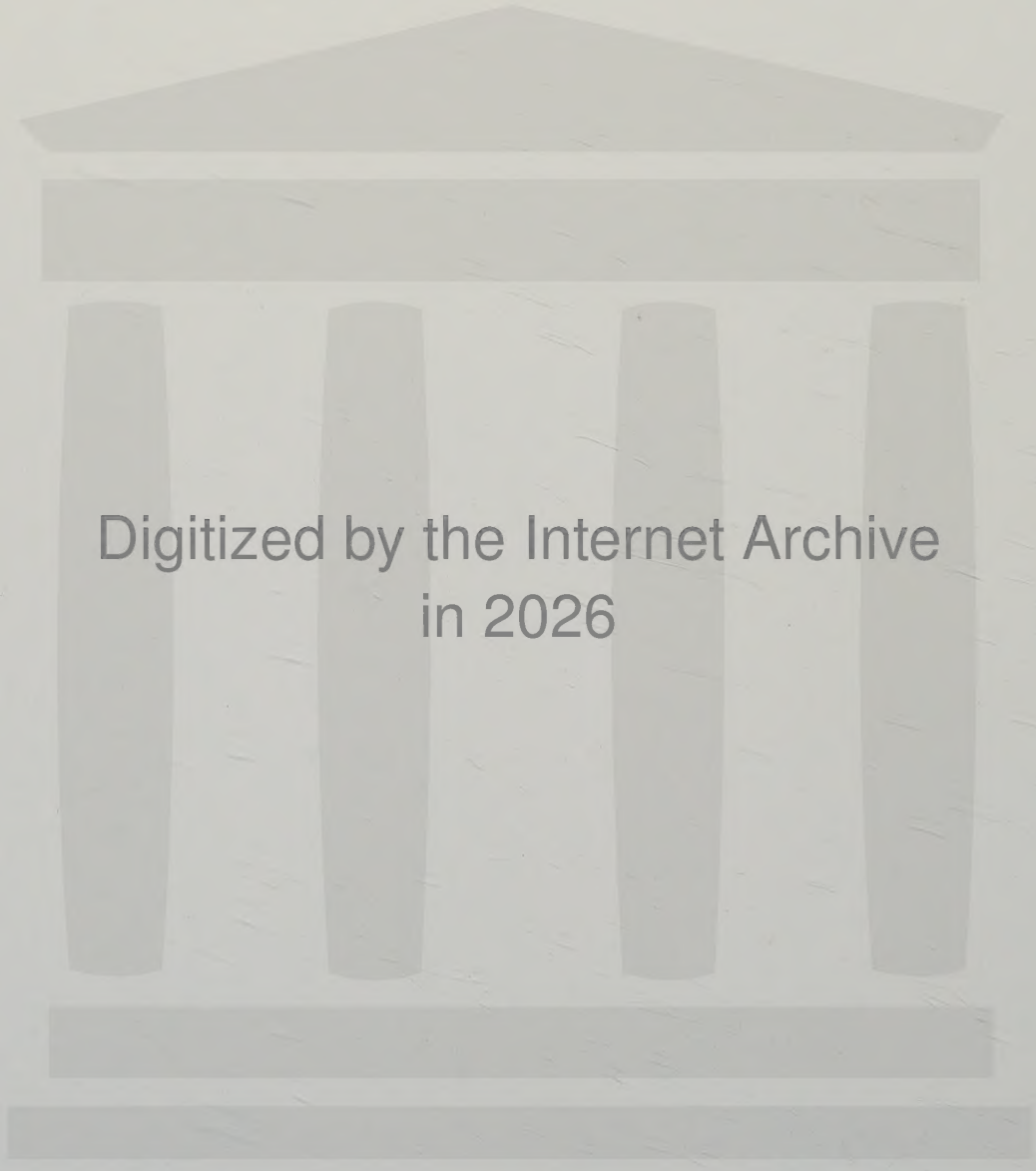
M Schöbinger.

Frankfurt a. M 1983.


Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550813_0005

SOLITONEN IN REALEN SYSTEMEN

Inaugural - Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaftlichen Fakultät

vorgelegt beim Fachbereich Physik

der

Johann Wolfgang Goethe-Universität

zu Franfurt am Main

von

Matthias Schöbinger

Frankfurt am Main 1983

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik der
Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main

Dekan: Prof. W. Jung
1. Berichterstatter: Prof. Dr. R.J. Jelitto
2. Berichterstatter: Prof. Dr. H.G. Schuster
Tag der Promotion: 12.10.1983

ÜBERBLICK

Eine Vielzahl physikalischer Systeme wird durch nichtlineare Evolutionsgleichungen beschrieben (z.B. Navier-Stokes-Gleichung, Landau-Lifshitz-Gleichung). Die Untersuchung solcher Gleichungen ist insbesondere deshalb interessant, weil die Nichtlinearität zu neuen Phänomenen führen kann, die sich nicht im Rahmen einer von der linearisierten Form der Gleichungen ausgehenden Störungstheorie beschreiben lassen. Von den nichtlinearen Systemen gilt gegenwärtig das Interesse vor allem einer speziellen Klasse nichtlinearer partieller Differentialgleichungen, die neben den gewöhnlichen Lösungen aus der linearisierten Beschreibung auch sogenannte Solitonen-Lösungen aufweisen. Solitonen sind räumlich lokalisierte, propagierende Wellen mit stationärem Profil, die aus der gegenseitigen Streuung ohne Form- und Geschwindigkeitsänderung hervorgehen. Solitonen zeigen damit deutlich Eigenschaften ausgedehnter Teilchen. Sie unterscheiden sich wesentlich von den Lösungen aus der linearisierten Beschreibung, auch insofern, als sie nicht durch Überlagerung aus den linearen Lösungen gewonnen werden können. Bemerkenswert ist vor allem, daß die Solitonen im Rahmen einer klassischen Theorie existieren, ohne daß es einer quantenmechanischen Begründung ihrer Stabilität bedarf. Die Eigenschaften bei der Streuung legen es nun nahe, die Solitonen als zusätzliche Elementaranregungen im nichtlinearen System aufzufassen. Daß sich Eigenschaften nichtlinearer Systeme im Rahmen der Vorstellung von einer Überlagerung unabhängiger Solitonen erklären lassen, obwohl das Superpositionsprinzip aus der linearisierten Beschreibung nicht übertragbar ist, stellt den wesentlichen Fortschritt bei der Behandlung nichtlinearer Systeme dar.

Bei der Anwendung des Solitonen-Konzeptes auf reale Systeme ist nun zu berücksichtigen, daß die Abbildung der entsprechenden Evolutionsgleichungen auf eine Soliton-tragende Gleichung in den meisten Fällen nur näherungsweise möglich ist. Die vorliegende Arbeit untersucht deshalb an einigen wichtigen Beispielen der aktuellen Diskussion, inwieweit das Solitonen-Konzept auf reale Systeme übertragen werden kann. Neben der Untersuchung von Solitonen im Rahmen der exakten Bewegungsgleichungen steht dabei im Vordergrund insbesondere der Einfluß zusätzlicher Freiheitsgrade des Systems, sowie der Einfluß von Verunreinigungen und thermischen Fluktuationen auf Existenz und Stabilität der Solitonen in realen Systemen.

Inhaltsverzeichnis Seite

I Einleitung und Übersicht 1

1 Problemstellung und Begriffsbildung 1

2 Charakteristische Modelle 10

2.1 Die nichtlinearen Klein-Gordon-Gleichungen 10

2.2 Klassische statistische Mechanik: Statische Eigenschaften 13

2.3 Dynamische Eigenschaften 18

3 Magnetische Modellsysteme 24

3.1 1D Spinketten 24

3.2 Blochwände in 3D Materialien 31

4 Diskrete Modellsysteme und numerische Simulation 32

II Erweitertes Band von Solitonen in planaren Ferromagneten 39

1.1 Die Bewegungsgleichung 42

1.2 Sine-Gordon-Limes und Stabilität 44

2 Exakte Resultate 47

2.1 Statische Lösungen 47

2.2 Asymptotik 48

2.3 Übergang vom SG-Modell zum isotropen Heisenberg-Modell 54

3 Variationsrechnung 57

3.1 Eigenschaften des Ansatzes 57

3.2 Das erweiterte Solitonen-Band im Rahmen des Ansatzes 61

4 Numerische Simulation 66

4.1 Das erweiterte Solitonen-Band 68

4.2 Diskretheitseffekte und Soliton-Soliton-Streuung 74

5 Zusammenfassung 77

III Magneto-elastische Wechselwirkung 82

1 Das eindimensionale Modell 85

2 Modellsysteme 91

Seite

3 Die Phonon-Soliton-Wechselwirkung 93

4 Dynamische Dämpfung der Solitonenbewegung 97

5 Zusammenfassung 103

IV Topologische Instabilität von Kinks in 1D Spinketten 105

1 Das Modell 108

2 Das statische Problem 113

2.1 Das statische Soliton 113

2.2 Stabilitätsanalyse 118

3 Dynamik 122

3.1 Lokalisierungspotential 122

3.2 Numerische Simulation 125

4 Systeme mit π-Kink 133

5 Zusammenfassung 135

V Temperaturabhängigkeit der Solitonenbreite 139

1 Das Modellsystem 147

2 Harmonische Phononen 153

3 Der Variationsansatz 155

4 Auswertung des Variationsansatzes 160

5 Ergebnisse und Diskussion 162

VI Resümee 168

Anhang 169

Referenzen

I Einleitung und Übersicht

I 1 Problemstellung und Begriffsbildung

Vor 150 Jahren beobachtete der Brite John Scott-Russell (1844) ein neues Wellenphänomen in einem flachen Wasserkanal: die sogenannten solitären Wellen. Diese Wellen sind dadurch gekennzeichnet, daß sie weder auseinanderlaufen noch aufsteilen. Vielmehr behalten sie bei der Ausbreitung ihre Gestalt bei und zeigen deutlich Eigenschaften von ausgedehnten Teilchen. 1895 gelang Korteweg und de Vries eine einfache analytische Begründung für dieses Phänomen im Rahmen einer Gleichung für Wellen im flachen Wasser. Wesentliches Merkmal der nach diesen Autoren benannten Gleichung ist, daß sie neben der Dispersion auch eine Nichtlinearität enthält. Die solitären Wellen unterscheiden sich nun wesentlich von den Lösungen aus der linearisierten Beschreibung, da sie nicht durch Überlagerung aus den linearen Lösungen gewonnen werden können. Bemerkenswerter ist jedoch die Tatsache, daß die solitären Wellen im Rahmen einer klassischen Theorie existieren, ohne daß es einer quantenmechanischen Begründung ihrer Stabilität bedarf. So wird im Falle der Korteweg-de Vries-Gleichung die Dispersion, die bei der Benutzung von Wellenpaketen zur Beschreibung ausgedehnter Teilchen zu einem Zerfließen der Konfiguration führt, durch die Nichtlinearität gerade kompensiert.

Sehr viel später wurde dann die Frage nach dem Ergebnis einer Streuung verschiedener solitärer Wellen aneinander untersucht und zwar durch numerische Integration der Bewegungsgleichungen. Zabusky und Kruskal (1965) fanden dabei, daß die solitären Wellen der Korteweg-de Vries-Gleichung aus der Streuung ohne Form- und Geschwindigkeitsänderung hervorgehen. Dieses Resultat stellt eine

weitere Bestätigung des Teilchencharakters dieser Wellen dar. Zabusky und Kruskal haben für Wellen mit dieser Eigenschaft den Begriff "Soliton" eingeführt. Schon einige Jahre zuvor hatten Perring und Skyrme (1962) die Streuung solitärer Wellen einer anderen wichtigen nichtlinearen Gleichung, der Sine-Gordon (SG) Gleichung, untersucht. Ebenfalls durch numerische Integration fanden sie Solitonen-Eigenschaften hinsichtlich der gegenseitigen Streuung dieser Wellen. Zusätzlich fanden Perring und Skyrme einen analytischen Ausdruck, der den Streuprozeß beschreibt und interessanterweise schon einige Jahre zuvor von Seeger et al (1953) abgeleitet worden war.

Die speziellen nichtlinearen Differentialgleichungen (siehe z.B. Scott et al 1973), die Solitonen erlauben, spielen nun für die Untersuchung teilchenartiger Lösungen gerade deshalb eine besondere Rolle, weil sie weitgehend analytisch behandelbar sind. Die in Zusammenhang mit diesen Differentialgleichungen integrabler Systeme entwickelten exakten mathematischen Methoden zur Beschreibung nichtlinearer Systeme (siehe z.B.: Bullough und Caudrey 1980, Lamb 1980, Eilenberger 1981) bilden mittlerweile die Grundlage für physikalische Anwendungen des Solitonen-Konzepts. Dabei werden die Solitonen als zusätzliche "Elementaranregungen" aufgefaßt. Die Tatsache, daß die Solitonen nicht durch Überlagerung aus anderen Anregungen des Systems gewonnen werden können, zusammen mit der Invarianz der Solitonen bei ihrer gegenseitigen Streuung legen eine solche Vorstellung nahe, wenngleich das aus der linearen Theorie bekannte Superpositionsprinzip natürlich nicht ohne weiteres auf ein nichtlineares System übertragen werden kann.

Als Folge der speziellen mathematischen Gestalt der Differentialgleichungen integrabler Systeme ist eine Beschreibung realer

Systeme im Rahmen dieser Gleichungen in den meisten Fällen jedoch nur näherungsweise möglich. Zu klären bleibt dann die Frage, inwieweit das Solitonen-Konzept in realen Situationen verwendet werden kann, bzw. inwieweit die in Zusammenhang mit den exakt lösbaren Gleichungen gewonnenen Vorstellungen unabhängig von der speziellen mathematischen Gestalt sind. Im Rahmen von Beispielen aus der Festkörperphysik beschäftigt sich die vorliegende Arbeit mit dieser Fragestellung.

Besonders wichtig für die Festkörperphysik ist die Sine-Gordon (SG) Gleichung

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = \sin \varphi \qquad \text{I.1}$$

bzw. die Klasse nichtlinearer Klein-Gordon (KG) Gleichungen, die sich durch Modifikation des nichtlinearen Terms in I.1 ergeben. Die SG-Gleichung hat im statischen Fall eine nichtlineare Lösung der Form

$$\varphi(z) = 4 \tan^{-1} e^{z} \qquad \text{I.2}$$

die oft auch einfach als "Kink" bezeichnet wird. Diese Lösung erfüllt die Randbedingungen

$$\lim_{z \to \pm\infty} \varphi = 2\Pi, \; 0 \quad .$$

Man kann deshalb eine "topologische Ladung"

$$Q = \frac{1}{2\Pi} \left(\varphi(+\infty) - \varphi(-\infty) \right) \qquad \text{I.3}$$

einführen, für die ein Erhaltungssatz gilt. Dieser topologische Erhaltungssatz gewährleistet die Stabilität des SG-Solitons. Die Solitonen können aus dem selben Grund nicht zerfallen, wie ein Knoten in einem unendlich langen Faden nicht beseitigt werden

kann, ohne den Faden zu zerschneiden. Ein anschauliches Beispiel für diese Begriffsbildung ist eine lange Kette torsionsgekoppelter, mechanischer Pendel, die sich unter dem Einfluß der Schwerkraft in einer Ebene senkrecht zur Kettenrichtung bewegen können (Scott 1969). φ beschreibt in diesem Modell die Auslenkung eines Pendels aus der Gleichgewichtslage. Die Terme $\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}$ und $\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}$ in der SG-Gleichung I.1 folgen aus der kinetischen Energie des Pendels bzw. der Torsionskopplung an die benachbarten Pendel. Der nichtlineare Term $\sin\varphi$ beschreibt das durch das Schwerefeld hervorgerufene rücktreibende Drehmoment für ein Pendel. Die Lösung I.2 bedeutet im Falle der beschriebenen Pendelkette eine auf einen engen räumlichen Bereich begrenzte Drehung der Pendel um 2π, wobei die Pendel am Anfang ($\varphi = 0$) und am Ende ($\varphi = 2\pi$) der Kette jeweils entlang dem Schwerefeld ausgerichtet sind. Es ist nun augenscheinlich, daß eine solche Konfiguration nicht zerstört werden kann, wenn nicht die Kopplung zwischen zwei Pendeln im Bereich der Drehung unterbrochen wird. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von "topologischen Solitonen" (Parsa 1979).

Üblicherweise bleiben bei der Definition topologischer Solitonen die Eigenschaften bei der gegenseitigen Streuung unberücksichtigt. Da, wie bereits oben angesprochen wurde, der Verwendbarkeit von Differentialgleichungen integrabler Systeme aufgrund ihrer speziellen Gestalt Grenzen gesetzt sind, ist dieser verallgemeinerte Begriff des topologischen Solitons von größerer physikalischer Relevanz. So folgt schon in der Klasse nichtlinearer KG-Gleichungen allein die SG-Gleichung aus einer integrablen Theorie. Hingegen erlauben alle Gleichungen dieser Klasse topologische Solitonen. Erst die Möglichkeit, daß die Ergebnisse für integrable Systeme auf den Fall topologischer Solitonen verallgemeinert werden können,

macht damit letztlich die praktische Bedeutung des Solitonen-Konzeptes aus.

Dem Begriff des topologischen Solitons kommt in Hinblick auf reale Systeme aber noch eine weitere Bedeutung zu, da in solchen Systemen sicherlich Dämpfungseffekte auftreten, die in den nichtlinearen KG-Gleichungen nicht berücksichtigt sind. Betrachtet man dazu ein propagierendes Soliton, so kann infolge des topologischen Erhaltungssatzes nur kinetische Energie dissipiert werden. Das Soliton relaxiert damit gegen die statische Konfiguration und kommt zur Ruhe. In diesem Sinne kann daher ein topologisches Soliton auch unter dem Einfluß einer Dämpfung phänomenologisch als Teilchen aufgefaßt werden. Diese Eigenschaft unterscheidet topologische Solitonen von Solitonen anderen Typs, wie beispielsweise den nichtlinearen Lösungen der Korteweg-de Vries Gleichung.

Die Zusammensetzung der Hamiltonfunktion der Pendelkette aus kinetischer Energie (Rotation), "Hooke'scher Energie" (Torsionskopplung) und lokalem, periodischen Potential (Schwerefeld) ist charakteristisch für Systeme der Festkörperphysik, die in Zusammenhang mit der SG-Gleichung diskutiert wurden. So wurde die SG-Gleichung verwendet als eindimensionales (1D) Modell für Versetzungen in Kristallen (Seeger et al 1953, Seeger und Schiller 1966), inkommensurable Phasen von Monolagen auf einem periodischen Substrat (Frank und Van der Merwe 1949), propagierende Flußquanten in Josephson-Kontakten (Nakajima et al 1975), sowie Blochwände in uniaxialen Ferromagneten (Enz 1964), um nur die Beispiele zu nennen, die noch im Rahmen dieser Arbeit in entsprechendem Zusammenhang erwähnt werden. (Für einen Überblick siehe auch: Barone et al 1971, Lonngren und Scott 1978, Bishop und Schneider 1978, Bernasconi und Schneider 1980, Maki 1982.) Ein Beispiel für eine andere wichtige nichtlineare KG-Gleichung erhält man aus der SG-

Gleichung durch Entwicklung des nichtlinearen Terms bis zur dritten Ordnung in φ . Gl. I.1 geht dann in die Bewegungsgleichung der sogenannten φ^4 - Theorie über, deren lokales Potential aus zwei durch eine endliche Energiebarriere getrennte Potentialminima gegeben ist. Dieses Modell ist in Zusammenhang mit strukturellen Phasenübergängen diskutiert worden (Krumhansl und Schrieffer 1975).

In den oben genannten Anwendungsbeispielen werden unabhängig von der Raumdimension immer nur einzelne Aspekte betrachtet, für die eine quasi-eindimensionale Betrachtung ausreicht. Die Auswertung der klassischen statistischen Mechanik für die Hamiltonfunktionen der nichtlinearen KG-Gleichungen und speziell die Bestimmung des Beitrages der Solitonen zu experimentell meßbaren Größen ist jedoch auf Systeme in einer Raumdimension beschränkt.

Zum einen ist die klassische statistische Mechanik nichtlinearer Systeme im allgemeinen nur in einer Dimension exakt auswertbar, zum anderen gibt es aber auch keine triviale Verallgemeinerung des Konzeptes topologischer Solitonen auf mehrere Raumdimensionen (Derrick 1964). Die Untersuchung der thermodynamischen Eigenschaften von 1D Systemen ist aber dennoch nicht nur auf die Theorie beschränkt. Eine sinnvolle Realisierung eines 1D Systems kann in einem Festkörper dann vorliegen, wenn seine verschiedenen Bausteine so angeordnet sind, daß hinreichend anisotrope Werte für die relevanten Kopplungsparameter auftreten. Besonders erfolgreich ist dieser Zugang bei einer Vielzahl magnetischer Substanzen (de Jongh und Miedema 1974, Steiner et al 1976). In dem planaren Ferromagneten $CsNiF_3$, sowie dem Heisenberg-Antiferromagneten $(CH_3)_4NMnCl_3$ (TMMC) sind beispielsweise die magnetischen Ionen in Ketten so angeordnet, daß der Abstand zwischen Ionen in einer Kette deutlich kleiner ist als der zu Ionen in anderen Ketten.

Infolge des exponentiellen Abfalls der atomaren Wellenfunktionen ist daher die Kopplung zwischen den Ketten sehr viel geringer als in Kettenrichtung und die einzelnen Ketten können als effektiv unabhängig angenommen werden. Beide Substanzen, deren Eigenschaften zudem ausgiebig experimentell untersucht sind, haben deshalb für den Nachweis von Solitonen große Bedeutung (Mikeska 1979, Steiner 1979b, 1981, Regnault et al 1982).

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich deshalb auch weitgehend mit der Anwendung des Konzeptes topologischer Solitonen auf diese Substanzen. In magnetischen Systemen stellt nun die Abbildung der Bewegungsgleichung für klassische Spins auf eine einkomponentige Differentialgleichung, wie beispielsweise Gl. I.1, eine weitere einschneidende Näherung dar. Speziell im Falle von $CsNiF_3$ hat diese Tatsache zu einer Kontroverse hinsichtlich der Existenz von Solitonen geführt. Die Spinbewegung ist im allgemeinen nicht auf eine Ebene beschränkt, wodurch die Voraussetzung für den am Beispiel der Pendelkette veranschaulichten topologischen Erhaltungssatz nicht mehr gegeben ist. Es werden deshalb bisher noch nicht vollständig berücksichtigte Konsequenzen aus dem Fehlen des topologischen Erhaltungssatzes besonders auch in Hinblick auf die Interpretation der experimentellen Ergebnisse von $CsNiF_3$ untersucht. Da neben der Diskretheit der Modellsysteme immer auch eine Kopplung zwischen magnetischen und elastischen Freiheitsgraden vorliegt, wird darüberhinaus auch diese Kopplung untersucht. Die Konsequenzen für den topologischen Erhaltungssatz stehen dabei ebenso im Vordergrund, wie bei dem weiterhin behandelten Problem von Solitonen in verunreinigten magnetischen Substanzen. Schließlich werden noch Modifikationen der Solitonenkonfiguration als Folge thermischer Fluktuationen untersucht. Zur Vereinfachung wird in der vorliegenden Arbeit für nichtlineare Anregungen all-

gemein die Bezeichnung Soliton verwendet. Sofern die speziellen Eigenschaften der Anregungen nicht aus dem Zusammenhang hervorgehen, werden diese durch die Bezeichnung "solitäre Welle" (Lösung mit stationärem Profil), "topologisches Soliton" (Lösung mit erhaltener topologischer Ladung) bzw. "striktes Soliton" (Soliton einer Differentialgleichung eines integrablen Systems) betont. Im Falle topologischer Solitonen wird wechselweise auch der Begriff Kink verwendet.

Die Arbeit ist nun wie folgt gegliedert. Als Grundlage wird im Rest von Abschnitt I zunächst am Beispiel der Klasse nichtlinearer KG-Gleichungen die Erweiterung des Solitonen-Konzeptes auf nicht-integrable Systeme diskutiert (Kapitel I 2). Insbesondere wird deutlich gemacht, daß es durchaus sinnvoll ist, die Eigenschaften einzelner, unabhängiger Solitonen, sei es analytisch oder durch numerische Simulationen zu untersuchen. Neben einer Zusammenfassung spezifischer Resultate für die magnetischen Substanzen $CsNiF_3$ und TMMC wird in Kapitel I 3 auf die Frage eingegangen, in welchem Sinne speziell $CsNiF_3$ durch eine klassische Hamiltonfunktion beschreibbar ist. Am Beispiel dreidimensionaler magnetischer Substanzen wird auch angedeutet, wie unter Beschränkung auf spezielle Konfigurationen Blochwände in diesen Materialien im Rahmen eines 1D Modells behandelt werden können. Nicht der makroskopische Aspekt von Solitonen in dreidimensionalen Systemen, der in den bei der Bestimmung von Magnetisierungskurven in Ferromagneten zu beobachtenden Phänomenen wie Remanenz bzw. Koerzitivkräften zum Ausdruck kommt, sondern vielmehr die in diesem Zusammenhang verwendeten Methoden sind für die vorliegende Arbeit von Bedeutung. Als Grundlage für numerische Simulationen wird schließlich in Kapitel I 4 darauf eingegangen, inwieweit Kontinuumsresultate in einem diskreten System, wie es ja auch die Spinketten darstellen,

reproduziert werden können. Die diskrete Translationsinvarianz stellt ein erstes Beispiel für eine Störung des idealen Systems dar. Abschnitt II befaßt sich dann mit der Kontroverse hinsichtlich der Abbildung der Hamiltonfunktion von $CsNiF_3$ auf das SG-Modell. Unter Berücksichtigung der vollständigen Spindynamik werden neue Lösungen bestimmt, die das bisher bekannte Band von Solitonen erweitern. Dieses erweiterte Solitonen-Band zeigt, daß bei experimentell relevanten Magnetfeldern auch ohne einen topologischen Erhaltungssatz teilchenartige Anregungen existieren, deren wesentliche Züge durchaus durch die SG-Theorie beschrieben werden. Die Kopplung der magnetischen an die elastischen Freiheitsgrade des Gitters ist Gegenstand von Abschnitt III. Das wesentliche Ergebnis dieses Abschnitts besteht darin, daß das Solitonen-Konzept mit der magneto-elastischen Kopplung kompatibel ist, solange eine Kontinuumsbeschreibung gerechtfertigt ist. Die Kopplung führt jedoch zu einer dynamischen Dämpfung der Solitonenbewegung. Als weitere Ursache für eine solche Dämpfung wird in Abschnitt IV der Einfluß von Verunreinigungen auf die Solitonendynamik untersucht. Besonders interessant ist in diesem Fall, daß die Streuung an Verunreinigungen einen Zerfallskanal für Solitonen, deren topologische Ladung im reinen System einem Erhaltungssatz unterliegt, darstellen kann. Diese Situation ist damit ein Beispiel für einen Prozeß, bei dem ein Übergang zwischen Anregungen verschiedenen Typs (Soliton → Magnonen) stattfindet. In Abschnitt V wird schließlich der Einfluß thermischer Fluktuationen auf eine Solitonenkonfiguration untersucht. Anstelle der magnetischen Spinketten bietet sich zur Untersuchung dieser Problemstellung das zweidimensionale System einer leicht inkommensurablen Monolage Krypton auf Graphit an, da ein Vergleich mit vorliegenden Ergebnissen einer Molekulardynamik (MD) Simulation durchgeführt

werden kann. Ein weiterer Vorteil besteht darin, daß die Modellparameter des simulierten Systems wohldefiniert sind. Momentaufnahmen der MD-Simulation liefern zudem den direkten Hinweis, daß die Wandkonfiguration zwischen kommensurablen Bereichen im Rahmen eines quasi-eindimensionalen Modells behandelt werden kann (vgl. Blochwände, Kapitel I 3).

I 2 Charakteristische Modelle

I 2.1 Die nichtlinearen Klein-Gordon-Gleichungen

Die nichtlinearen Klein-Gordon (KG) Gleichungen (siehe z.B. Bishop 1979a) folgen aus der klassischen Hamiltondichte

$$H\{\varphi, \varphi_t\} = A\{\frac{1}{2}\varphi_t^2 + \frac{C}{2}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2 + B\,V(\varphi)\} \qquad \text{I.4}$$

und haben die Form

$$C\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} - \frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} = B\frac{dV(\varphi)}{d\varphi} \qquad \text{I.5}$$

Die Parameter A, B, C hängen vom jeweiligen Modell ab. Die KG-Gleichungen kombinieren also eine 1D Wellengleichung mit einer lokalen Nichtlinearität. Mit dem Potential $V(\varphi) = 1 - \cos\varphi$ ergibt sich sofort die SG-Gleichung I.1. Die räumlich konstanten Lösungen minimaler Energie werden als Vakua bezeichnet. Lösungen kleiner Abweichungen von den Vakua, die sogenannten Mesonen bzw. im Falle magnetischer Systeme die Magnonen, folgen aus der gewöhnlichen Klein-Gordon-Gleichung $\left(\frac{dV(\varphi)}{d\varphi} \to \varphi\right)$. Aus dieser Eigenschaft leitet sich die Bezeichnung "nichtlineare Klein-Gordon-Gleichungen" für die Gleichungen I.5 ab. Voraussetzung für die Existenz der in

Kapitel I 1 veranschaulichten topologischen Solitonen ist, daß $V(\varphi)$ mindestens zwei entartete Vakua φ_1 und φ_2 aufweist. Ist zusätzlich $V(\varphi)$ auf dem Intervall (φ_1,φ_2) beschränkt, so hat I.5 neben Mesonen auch Lösungen in der Form propagierender Kinks $\varphi_K(Z)$, $Z = z - ut$ (Geschwindigkeit u), die durch

$$Z = \gamma^{-1} \frac{d}{2^{1/2}} \int_{\varphi_K(0)}^{\varphi_K(Z)} d\varphi \left(V(\varphi) \right)^{1/2} \qquad \text{I.6}$$

mit $\gamma^{-2} = 1 - u^2/c_o^2$ gegeben sind. Diese Kinks haben eine Energie $E_K \propto A(BC)^{1/2} \gamma$ und stellen die energetisch günstigste Konfiguration dar, die asymptotisch die beiden Vakua verbindet. Die minimale Energie ergibt sich für die statische Konfiguration. Das Spektrum der topologischen Solitonen weist daher eine Lücke $E_o \propto A(BC)^{1/2}$ auf. Die Kink-Konfiguration hat eine typische Ausdehnung der Größenordnung $2 \cdot d/\gamma = 2(C/B)^{1/2}$. Diese Breite resultiert aus der Konkurrenz von "Hooke'scher Energie" und lokalem Potential, die jeweils eine größere bzw. geringere Breite favorisieren. Die Lösungen der Form I.6 sind auf den Geschwindigkeitsbereich $|u| < c_o = C^{1/2}$ beschränkt. Aufgrund der Lorentzinvarianz von I.5 kann c_o als Grenzgeschwindigkeit interpretiert werden. Die Lorentzinvarianz führt darüberhinaus dazu, daß sich die Form der Kinks, abgesehen von der durch γ beschriebenen Lorentzkontraktion, nicht ändert. Die aus I.3 folgende topologische Ladung $Q = 1$ läßt sich auch in der Form

$$Q = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dZ \, \frac{\partial \varphi_K}{\partial Z} \qquad \text{I.7}$$

durch die Kink-Lösung ausdrücken. Aus der Inversionssymmetrie bezüglich $z = 0$ folgt damit sofort durch den Übergang $\frac{\partial \varphi}{\partial z} \to -\frac{\partial \varphi}{\partial z}$ eine zu I.6 äquivalente Lösung von I.5. Wegen $Q = -1$ wird diese Lösung als Antikink bzw. Antisoliton bezeichnet. Nur in Form von Soliton-

Antisoliton-Paaren können in einer idealen nichtlinearen KG-Theorie nichtlineare Anregungen erzeugt bzw. vernichtet werden.

Für die SG-Gleichung läßt sich I.6 analytisch auflösen und der Kink ist durch

$$\varphi_K(Z) = 4 \tan^{-1} \exp(\gamma Z/d) \qquad \text{I.6a}$$

gegeben. Neben den Mesonen und den Solitonen erlaubt die SG-Gleichung noch sogenannte Pulsatonen (englisch "breather"), die wie Mesonen Auslenkungen um ein Vakuum, jedoch mit großer, räumlich lokalisierter Amplitude darstellen. Die explizite raum-zeitliche Form der Pulsatonen ist für die vorliegende Arbeit ohne Bedeutung (Einzelheiten z.B. bei Eilenberger 1981). Wichtig ist aber, daß man das Pulsaton als gebundenes, pulsierendes Soliton-Antisoliton-Paar auffassen kann.

Mit Hilfe der "Inversen Streutheorie" (siehe z.B. Eilenberger 1981) kann nun gezeigt werden, daß jede Lösung der SG-Gleichung als Überlagerung von Solitonen (Antisolitonen), Pulsatonen und Mesonen dargestellt werden kann. Darüberhinaus zeigt sich auch, daß sogar jede Konfiguration $\varphi(z,t)$ im Laufe der Zeit in diese Moden zerfällt, die dann räumlich getrennt sind. In diesem Sinne ist die SG-Gleichung integrabel und die Gesamtenergie setzt sich additiv aus Einzelbeiträgen der verschiedenen möglichen Anregungen zusammen. Diese Separation des Hamiltonian ist der Ursprung für die in Kapitel I 1 erwähnte Vorstellung von Solitonen als Elementaranregungen. Bedeutsam für die phänomenologische Beschreibung von topologischen Solitonen als Teilchen in nichtintegrablen Systemen (Zusammenfassung z.B. bei Currie et al 1980) ist die Klasse nichtlinearer KG-Gleichungen deshalb, weil eine Vielzahl von Gleichungen analytisch behandelbar ist. Beispiele, für die I.6 explizit aufgelöst werden

kann, umfassen neben dem SG-Potential unter anderem auch φ^4: $V = \frac{1}{8}(\varphi^2 - 1)^2$, "Doppel-Sine-Gordon" (DSG): $V = -(\cos\varphi + \eta \cos 2\varphi)$, und "Doppel-quadratisches" (DQ) - Potential: $V = \frac{1}{2}(|\varphi|^2 - 1)$. Da auch im Rahmen des DQ-Potentials eine phänomenologische Beschreibung der Kinks möglich ist (siehe Kapitel I 2.2), kann dieses Potential auch immer als erste Näherung für Potentiale, deren Solitonen nicht analytisch bestimmbar sind, herangezogen werden (Horovitz et al 1977, Koch 1980). Daneben gibt es aber auch Beispiele, bei denen die Eigenschaften numerisch gewonnener Lösungen von I.6 weitgehend bestimmbar sind (Peyrard und Remoissenet 1982).

I 2.2 Klassische statistische Mechanik: Statische Eigenschaften

Die ursprüngliche Motivation für die Vorstellung von Solitonen als Elementaranregung folgt aus der klassischen statistischen Mechanik. Betrachtet man die Zustandssumme Z im Wegintegralformalismus:

$$Z = \int D\{\varphi,\varphi_t\}\, e^{-\beta\int H\{\varphi,\varphi_t\}dz} \qquad \text{I.8}$$

mit der durch Gleichung I.4 gegebenen Hamiltondichte $H\{\varphi, \varphi_t\}$, so wird Z durch alle stationären Phasentrajektorien dominiert. Da sich der von φ_t abhängige Anteil einfach auswerten läßt, ist sofort ersichtlich, daß das die Trajektorien des φ-Raumes sind, die den statischen Anteil der Hamiltonfunktion $H_{stat} = \int\{\frac{C}{2}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2 + B\,V(\varphi)\}\,dz$ minimieren. Dies sind aber gerade die Lösungen der entsprechenden statischen KG-Gleichung. Neben der Methode, das nichtlineare System phänomenologisch als Gas bestehend aus den verschiedenen Lösungen der KG-Gleichung, also auch den nichtlinearen, aufzufassen (Krumhansl und Schrieffer 1975), besteht zusätzlich die Möglich-

keit, die Zustandssumme I.5 mit der Transfermatrixmethode (TMM) exakt auszuwerten (Scalapino et al 1972). Da bei dieser Methode von vorneherein alle Anregungen des Systems berücksichtigt sind, folgt aus einem Vergleich der phänomenologischen Resultate für die statischen Eigenschaften mit der exakten Auswertung dann die Rechtfertigung für die der Phänomenologie zugrunde liegende Vorstellung. Ein solcher Zugang hat den Vorteil, daß er automatisch davon unabhängig ist, ob der Hamiltonian ein integrables System beschreibt. Der Verifikation der Phänomenologie kommt besondere Bedeutung deshalb zu, weil damit gezeigt werden kann, daß selbst metastabile Anregungen einen Beitrag zu experimentell relevanten Größen liefern können. Als erste haben das am Beispiel der φ^4-Theorie Krumhansl und Schrieffer (1975) gezeigt. Das exakte Ergebnis liefert in niedrigster Ordnung in der Temperatur einen Beitrag, bei dem die Energie $H_{stat}\{\varphi_K\} \equiv E_K$ des statischen Kinks φ_K die Rolle einer Aktivierungsenergie spielt. Dieser Term kann damit als Boltzmannfaktor für ein ideales Gas von φ^4-Kinks aufgefaßt werden, obwohl die in Kapitel I 2.3 zusammengefaßten Resultate zeigen, daß diese Kinks nur eine endliche Lebensdauer haben. Unabhängig davon zerfällt die exakte Zustandssumme jedoch nicht in ein Produkt von Zustandssummen der verschiedenen Anregungen, selbst wenn der Hamiltonian wie in integrablen Systemen in einzelne Anregungen separiert. Das liegt daran, daß es keine ideale nichtlineare Basis gibt und das Superpositionsprinzip aus der linearen Theorie eben nicht vollständig auf ein nichtlineares System übertragbar ist. So ergeben sich schon in niedrigster Ordnung im Rahmen der Sattelpunktsmethode Gauß'sche Korrekturen von den zu den dominanten Trajektorien benachbarten Trajektorien. Betrachtet man dazu das Spektrum der Mesonen in einem System mit einem Kink, so findet man

mindestens einen gebundenen Zustand mit verschwindender Energie. Dieser Zustand entspricht gerade der Goldestone-Mode, die ein Ausdruck der kontinuierlichen Translationsinvarianz des Kinks im System ist. Weitere gebundene Zustände, wie z.B. beim φ^4-Kink, entsprechen internen Anregungen des Kinks. Daneben sind nur die Wellenfunktionen, nicht jedoch das Spektrum der Kontinuumszustände modifiziert. Obwohl die spezielle Form dieser Wellenfunktion im Bereich des Kinks sehr kompliziert sein kann, muß sie sich doch weit entfernt vom Kink als Überlagerung ungestörter Mesonen darstellen lassen. Asymptotisch macht sich daher die Wechselwirkung der Mesonen mit dem Kink nur in Form einer Phasenverschiebung bemerkbar. Diese Phasenverschiebung hängt von der speziellen Form des Potentials ab, das durch den Kink hervorgerufen wird, und enthält die für das Weitere ausreichende Information über die Wechselwirkung. Wesentliche Konsequenz der Anwesenheit eines Kinks ist eine aus der Phasenverschiebung explizit herleitbare Änderung der Zustandsdichte der Mesonen dergestalt, daß die Gesamtzahl der Kontinuumszustände gerade um die Freiheitsgrade des Kinks verringert ist. Unabhängig davon, ob das Potential für die Mesonen transparent ist (z.B. bei φ^4 und SG) oder nicht (z.B. DQ), ist die Einschränkung des Superpositionsprinzips durch die Wechselwirkung der Anregungen im nichtlinearen System gerade durch diese Aufteilung des Phasenraumes gekennzeichnet, die die auch unter dem Stichwort "Friedel'sche Summenregel" bekannte Erhaltung der Gesamtzahl der Freiheitsgrade gewährleistet. Die Änderung der Zustandsdichte hat auch eine Änderung der Freien Energie der Mesonen zur Folge, die als Selbstenergiekorrektur des Kinks interpretiert werden kann (Currie et al 1980). Die grundlegenden Annahmen für eine phänomenologische Beschreibung der Anregungen nichtlinearer Felder unter Berücksichtigung der aus der Erhaltung der Gesamtzahl

der Freiheitsgrade resultierenden Phasenraumaufteilung zwischen diesen Anregungen lassen sich in vier Punkten zusammenfassen (Bishop et al 1980):

i) Vernachlässigbarkeit höherer als lineare Ordnung in der Solitonendichte n_s

ii) Vernachlässigbarkeit der Kink-Kink-Wechselwirkung

iii) Phasenverschiebungen paarweise additiv

iv) Nur Gauß'sche thermische Fluktuationen relevant

ii) und iv) folgen für integrable Systeme direkt aus der Inversen Streutheorie. Aus dieser lassen sich auch exakte Vielsolitonenlösungen bestimmen, an denen die Eigenschaft iii) nachweisbar ist (Currie 1977). Integrable Systeme sind also dadurch ausgezeichnet, daß die Punkte ii) - iv) für beliebige Temperaturen exakt erfüllt sind. Beschränkt man sich für Solitonenenergie E_K auf $O\left(\frac{K_B T}{E_K}\right)$ und $O(n_s)$, so führt die phänomenologische Beschreibung für die gesamte Klasse nichtlinearer KG-Gleichungen, also auch die nichtintegrablen Theorien, zum Ziel (Currie et al 1980). In allen Fällen ist Punkt i) äquivalent zur Annahme tiefer Temperaturen und gestattet die näherungsweise Beschreibung von Viel-Solitonen-Zuständen durch eine Überlagerung von Ein-Solitonen-Zuständen. Am Beispiel der SG-Theorie haben José und Sahni (1979, 1980) gezeigt, wie systematisch Korrekturen höherer Ordnung in der Solitonendichte berechnet werden können. Wegen der Lücke im Anregungsspektrum topologischer Solitonen ist deren Dichte bei tiefen Temperaturen jedoch exponentiell klein und die Beschränkung auf $O(n_s)$ ist gerechtfertigt. Die Lücke ist auch der Grund dafür, daß eine im Sinne eines Vergleichs mit dem exakten TMM-Ergebnis konsistente Phänomenologie bisher nur für topologische Solitonen vorliegt.

Wie die ursprüngliche Behandlung des φ^4 Modells von Krumhansl und Schrieffer (1975) zeigt, ergibt sich in einem solchen Fall schon ohne die Berücksichtigung der Kink-Meson-Wechselwirkung die dominante Temperaturabhängigkeit ("Aktivierungsenergie"). Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen,daß das Problem der klassischen statistischen Mechanik von nichtlinearen Anregungen, mit einem Spektrum ohne Lücke, noch nicht als gelöst betrachtet werden kann. Wie das Beispiel der Pulsatonen zeigt, ist infolge der großen Dichte der Anregungen in einem solchen Fall die Phasenraumaufteilung entscheidend, da sonst Divergenzen in der Freien Energie auftreten (Fesser 1979). In ersten Ansätzen zur Beseitigung der Schwierigkeit werden Pulsatonen niedriger Energie unterhalb eines mehr oder weniger physikalisch begründbaren Energiewertes ausgeschlossen (Timonen und Bullough 1981, Theodorakopoulos 1982). In demselben Sinne ist auch die thermodynamische Beschreibung des klassischen 1D isotropen Heisenberg-Modells unvollständig (Bishop 1981). Dieses Modell wird noch in Abschnitt II von Bedeutung sein. Der Vollständigkeit halber ist zu erwähnen daß in der Quantentheorie ein solches Problem nicht auftritt, da das Pulsatonspektrum diskret ist und die niedrigste Anregung mit dem fundamentalen Boson der Theorie identifiziert werden kann (Dashen et al 1975, Maki und Takayama 1979b).

Die bisher geschilderte Sattelpunktsmethode liefert für die topologischen Solitonen nur in niedrigster Ordnung in der Temperatur befriedigende Ergebnisse. Die aus der TMM resultierende Aktivierungsenergie ist im allgemeinen temperaturabhängig und geht nur im Limes verschwindender Temperatur in die Energie des statischen Kinks über, bei der die Nichtlinearität keine Rolle für die Mesonen spielt (Bishop 1979b). Die temperaturabhängige Aktivierungsenergie kann als thermisch renormierte Solitonenenergie aufgefaßt

werden. Der entsprechende Anschluß an die Beschreibung ausgedehnter Teilchen im Rahmen der Quantenfeldtheorie ist bei Trullinger (1979) zusammengefaßt. Die Berücksichtigung von Quantenfluktuationen um das durch seinen quantenmechanischen Impuls und die dazu konjugierte Schwerpunktskoordinate charakterisierte Soliton, führt zu Quantenrenormierung der Solitonenenergie. Im Gegensatz zu den thermischen Renormierungen, ergibt sich auf Grund der Nullpunktsschwingungen im Quantensystem schon eine Renormierung bei verschwindender Temperatur. Im Experiment beobachtete Abweichungen der Solitonenenergie vom klassischen $T = 0$ - Wert, werden gerade thermischen bzw. Quantenrenormierungen zugeschrieben (siehe Kapitel I 2.3, Abschnitt II Einleitung, sowie Kapitel II 5). Thermische bzw. Quantenfluktuationen können jedoch auch andere Solitonenparameter beeinflussen. So wird in Abschnitt V beispielsweise die Temperaturabhängigkeit der Solitonenbreite an einem Beispiel diskutiert. Hinzuweisen ist an dieser Stelle schon darauf, daß für thermische Effekte, die in numerischen Simulationen beobachtet werden, aufgrund der in Simulationen verwendeten klassischen Bewegungsgleichungen auch nur klassische Fluktuationen verantwortlich gemacht werden können.

I 2.3 Dynamische Eigenschaften

Deutlicher als in den statischen Eigenschaften kommt der Einfluß einzelner Anregungen in den dynamischen Korrelationen zum Ausdruck, die durch den dynamischen Strukturfaktor

$$S_{AA}(q,\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{-i\omega t}\, S_{AA}(q,t) \qquad \text{I.9}$$

beschrieben werden. Dabei ist

$$S_{AA}(q,t) = \langle A(q,t)\, A(-q,t)\rangle \qquad \text{I.10a}$$

$$A(q,t) = N^{-1} \sum_n e^{iqan}\, \delta A_n \qquad \text{I.10b}$$

$$\delta A_n = A_n - \langle A_n \rangle \qquad \text{I.10c}$$

wobei $\langle \ldots \rangle$ die übliche thermische Mittelung bedeutet und die dynamische Variable A für eine beliebige Funktion der Feldvariablen φ der Hamiltonfunktion I.1 steht. Wellenzahl und Frequenz sind mit q bzw. ω bezeichnet und n numeriert die Gitterplätze der zugrundeliegenden Kette mit Gitterkonstante a. Als Beispiel sei an dieser Stelle schon auf die Verwendung der SG-Theorie zur Beschreibung eines planaren Ferromagneten in symmetrie-brechendem Magnetfeld verwiesen, wo die Variable φ den Winkel in der Ebene leichter Magnetisierung zwischen Spin und Magnetfeld bezeichnet (Kapitel II 2.1). Experimentell relevant sind für dieses System die longitudinale bzw. transversale Spinkorrelationsfunktion $S_{\cos\varphi,\cos\varphi} = S_{cc}$ bzw. $S_{\sin\varphi,\sin\varphi} = S_{ss}$ und nicht $S_{\varphi\varphi}$. (Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, daß auch $S_{\varphi_t\varphi_t}$ zu den transversalen Spinkorrelationen beiträgt, für die Solitoneneigenschaften im SG-Modell jedoch ohne Bedeutung ist.) Entgegen dem statischen gibt es im dynamischen Fall keine exakten Resultate, die die Annahme eines idealen Solitonen-Gases zur Berechnung des Beitrages der Solitonen zu $S(q,\omega)$ rechtfertigen, da die TMM auf die Auswertung der statischen Korrelationen beschränkt ist. Auch die Forderung, daß der dynamische Strukturfaktor im statischen Grenzfall in das exakte TMM Resultat übergehen soll, liefert keine eindeutige Bedingung (Bishop 1881a). Man ist daher auf Molekulardynamik (MD) Simulationen angewiesen, wie sie z.B. für SG- und φ^4-Theorie durchgeführt wurden (Koehler et al 1975, Kerr et al 1981, Schneider

und Stoll 1981). Die entsprechenden Ergebnisse bei tiefen Temperaturen enthalten deutliche Hinweise auf den Einfluß von Kink Anregungen bei niedrigem q und ω ("zentraler Peak"). Unter Berücksichtigung der in Kapitel I 2.2 erwähnten thermischen Korrekturen niedrigster Ordnung (Bishop 1979b) haben Schneider und Stoll (1981) eine überraschend gute qualitative Übereinstimmung mit den phänomenologischen Voraussagen für das SG Modell gefunden. Dies zeigt, daß die Vorstellung eines idealen Solitonen-Gases zumindest für qualitative Aussagen auch im dynamischen Fall erfolgsversprechend ist. Da die MD Simulation die relativen Gewichte der Beiträge verschiedener Anregungen implizit berücksichtigt, ergibt sich allerdings darüberhinaus, daß nicht jede Korrelationsfunktion von den Kink-Beiträgen dominiert wird. In Hinblick auf die Kontroverse bezüglich der Auswertung der experimentellen Daten von $CsNiF_3$ (siehe Kapitel II 1) ist besonders interessant, daß bei tiefen Temperaturen zwar S_{ss} bei kleinem q und ω vom Beitrag der Kinks bestimmt wird, S_{cc} jedoch allein im Rahmen von Zwei-Mesonen-Differenzprozessen interpretiert werden kann (Schneider und Stoll 1981). Quantitative Vergleiche zwischen phänomenologischen und MD Resultaten, wie sie ausführlich bei Schneider und Stoll (1981), sowie Kerr et al (1981) zu finden sind, bilden nicht den Gegenstand der vorliegenden Arbeit. Wichtig ist vielmehr, daß auch die aus der MD Simulation abzulesende mikroskopische Zeitentwicklung des Systems die Existenz thermischer Anregungen mit Teilchencharakter, die sich zwischen den gegenseitigen Stößen weitgehend mit konstanter Geschwindigkeit bewegen, bestätigt. Der Charakter der zu beobachtenden Streuprozesse zwischen Kinks bzw. Kinks und Antikinks stimmt dabei im wesentlichen mit den Resultaten überein, die bei der separaten Untersuchung der Streuprozesse gewonnen wurden (Perring und

Skyrme 1962, Ablowitz et al 1979). So ist die Kink-Kink-Streuung neben der SG Theorie auch in den nichtintegrablen Systemen noch weitgehend dissipationsfrei. Demgegenüber können die Teilchen bei der Kink-Antikink-Streuung in Pulsaton-ähnliche Anregungen zerfallen. Dieser Zerfallsmechanismus läßt sich qualitativ dadurch erklären, daß die Teilchen aufgrund des Verlustes ihrer kinetischen Energie bei der Streuung die gegenseitige Anziehung nicht mehr überwinden können (Kudryavtsev 1975, Mihály 1979). Wegen der fehlenden Integrabilität gibt es keinen gebundenen Zustand zwischen Kink und Antikink, die entsprechende Anregung hat jedoch, wie auch die MD Simulation bestätigt, eine endliche Lebensdauer. Nach den Ergebnissen von Ablowitz et al (1979) werden streuende Kinks und Antikinks der φ^4-Theorie bei allen Relativgeschwindigkeiten vernichtet. Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, daß nach den Ergebnissen dieser Autoren bei anderen nichtintegrablen KG-Gleichungen jedoch der Energieverlust bei der Streuung so gering sein kann, daß sich Kink und Antikink abgesehen von Geschwindigkeitsänderungen nahezu wie strikte Solitonen verhalten (siehe dazu auch J.C.Eilbeck 1978 und die dort angegebenen Referenzen). Zu ergänzen ist in diesem Zusammenhang, daß bei der Berücksichtigung von Störungen bzw. einer phänomenologischen Dämpfung auch die Anregungen eines ursprünglich integrablen Systems zerfallen können (Nakajima et al 1974, Cirillo et al 1981). Allein die realistische Annahme eines diskreten Modellsystems von Schneider und Stoll (1981) führt dazu, daß (wenngleich in viel geringerem Ausmaß als in der φ^4-Theorie) im diskreten SG-Modell Solitonen zerfallen können. Auch die Beobachtung, daß die Pulsaton-Lebensdauer nicht unendlich ist, deutet darauf hin, daß das diskrete SG-Modell kein integrables System darstellt. (Es sei vorweggenommen, daß dieser "Diskretheitseffekt" von anderer Natur ist, als die in den Kapiteln I 4, II 4.2 und

IV 2 diskutierten Effekte, die ebenfalls mit der diskreten Natur des Modellsystems zusammenhängen). Angesichts dieser Ergebnisse ist es durchaus sinnvoll, als ersten Schritt die Anwendung des Solitonenkonzeptes im Rahmen der vorliegenden Arbeit auf die Untersuchung der Eigenschaften einzelner Solitonen zu beschränken, zumal diese Ergebnisse auch durch die numerische Simulation der Solitondynamik überprüft werden können. Die Beschränkung der Simulation auf ein Soliton hat allein pragmatische Gründe, da eine vollständige MD Simulation sehr Rechenzeit-aufwendig ist. Keinen Aufschluß erhält man dann lediglich über Zerfallsprozesse, die ihre Ursache in thermischen Fluktuationen haben. So beobachteten Schneider und Stoll (1981) beispielsweise Situationen, in denen φ^4-Kinks ihre Richtung umkehren und statt sich frei zu bewegen, eher einer Zufallsbewegung ("random walk") unterworfen sind. Sofern die einzelnen Solitonen stabil sind, bestimmen Form, Energie-Geschwindigkeitszusammenhang sowie Zeitabhängigkeit der Schwerpunktsbewegung den entsprechenden Beitrag zum dynamischen Strukturfaktor im Rahmen der Phänomenologie eines idealen Gases (Anhang). Aus der Simulation der gegenseitigen Streuung der Kinks ergeben sich zusätzliche Hinweise, in welchem Maß diese Teilchen denen eines integrablen Systems ähneln bzw. inwieweit Lebensdauereffekte eine Rolle spielen. Für die statischen Eigenschaften spielen weder Lebensdauereffekte, noch die Abweichungen von der freien Solitonenbewegung zwischen den gegenseitigen Stößen in niedrigster Ordnung eine Rolle. Solche Effekte scheinen hingegen die Ursache dafür zu sein, daß Schneider und Stoll (1981) für die φ^4-Theorie eine in Vergleich zur SG-Theorie deutliche Verbreiterung des zentralen Peaks aus der MD Simulation gegenüber dem phänomenologischen Resultat finden. Quantitative Korrekturen zur Phänomenologie des

idealen Gases, die die Kopplung zwischen einzelnen Moden über den Effekt der gegenseitigen Phasenraumbeschränkung hinaus berücksichtigen, liegen bis jetzt noch nicht vor. Gerade Prozesse, die mit der Umwandlung von Moden verknüpft sind, führen letztlich aber erst zur Ausbildung eines thermischen Gleichgewichts zwischen den einzelnen Anregungen. So kann man in der MD-Simulation neben dem Zerfall von Kinks und Antikinks in ein Pulsaton auch den umgekehrten Prozess des Aufbrechens eines Pulsatons in Kink und Antikink beobachten (Schneider und Stoll 1981). Abschließend sei noch auf Arbeiten verwiesen, die sich mit der Erzeugung von Solitonen durch äußere Felder beschäftigen. So diskutiert Karpman (1982) eben das Aufbrechen eines Pulsatons unter dem Einfluß eines äußeren Feldes im Rahmen der Vorstellungen wie sie oben beim analogen Zerfallsprozeß geschildert wurden. Daneben haben Büttiker und Landauer (1981) eine "Nukleationstheorie" für Kink-Antikink-Paare analog der Tropfenbildung in übersättigtem Dampf für ein überdämpftes SG-System in äußerem Feld entwickelt. Für experimentell zur Verfügung stehende Magnetfelder erhält man damit in 1D Magneten wie $CsNiF_3$ aber ebensowenig eine signifikant von der thermischen Dichte abweichende Zahl von Solitonen wie bei Anlegen eines räumlich inhomogenen Magnetfeldes (Hackenbracht und Schuster 1981). Eine solche Erhöhung der Zahl der Solitonen wäre in Hinblick auf die Untersuchung von Effekten höherer Ordnung in der Solitonendichte interessant.

I 3 Magnetische Modellsysteme

I 3.1 1D Spinketten

a) $CsNiF_3$

$CsNiF_3$ kristallisiert in der hexagonalen Raumgruppe $P6_3/mmc$ mit Gitterkonstante $a = b = 6.23$ Å und $c = 5.22$ Å (Steiner et al 1971). Die räumliche Struktur ist in Figur I.1 dargestellt. Deutlich zu erkennen sind die $Ni^{2+}F_3^-$ - Ketten entlang der c - Achse.

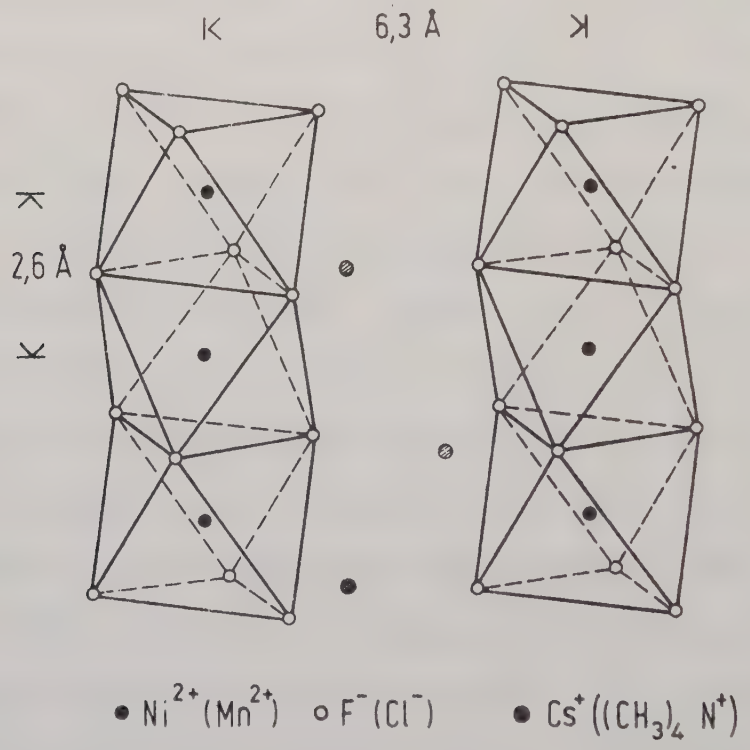


Fig. I.1 Struktur von $CsNiF_3$ und TMMC

Da jede Elementarzelle aus zwei Formeleinheiten besteht, ist der Ni-Ni-Abstand $\frac{c}{2} = 2.61$ Å sehr viel kleiner als der Abstand $a = 6.23$ Å zwischen den Ketten. Die einzelnen Ketten sind daher durch die dazwischen liegenden Cs^+ - Ionen weitgehend magnetisch voneinander

isoliert. Die F^- - Ionen vermitteln eine ferromagnetische Superaustausch-Kopplung in Kettenrichtung. Zusätzlich bewirkt die oktaedrische Anordnung dieser Ionen um die Ni^{2+} - Ionen eine Kristallfeldaufspaltung, aus der eine deutliche Ein-Ionen-Anisotropie resultiert. Allgemein wird angenommen, daß $CsNiF_3$ durch den Hamiltonian einer 1D Spinkette in der Form

$$H = -J \sum_n \vec{S}_n \vec{S}_{n+1} + A \sum_n (S_n^z)^2 \qquad \text{I.11}$$

beschrieben werden kann. J, A sowie $\vec{S}_n$ bezeichnen dabei das Austauschintegral, die Stärke der Anisotropie bzw. die Spinvariable am Gitterplatz n. Die z-Achse stimmt mit der Kettenrichtung überein.

Obwohl es in 1D Systemen keine langreichweitige Ordnung gibt, lassen sich Spinwellenresonanzen experimentell nachweisen (Steiner und Dorner 1973). Die Wellenlänge dieser Anregungen ist allerdings durch die aus der kurzreichweitigen Ordnung resultierende Korrelationslänge begrenzt. Daß sich diese Anregungen wirklich in einem 1D Modell interpretieren lassen, folgt aus der Tatsache, daß diese Spinwellen nur parallel, nicht jedoch senkrecht zur Kettenrichtung eine Dispersion aufweisen (Steiner 1979).

Aus den Spinwellen-Experimenten lassen sich auch die Modellparameter J und A bestimmen. Erstaunlich ist dabei, daß sich das Spektrum der Anregungen trotz des kleinen Spinwertes S = 1 der Ni^{2+} - Ionen auf der Basis einer klassischen Behandlung des Hamiltonian I.11 interpretieren läßt (Steiner und Dorner 1973, Villain 1973). Aus dieser Bahandlung ergeben sich die Werte $J/k_B = 23$ K und $A/k_B = 5$ K.

Im Rahmen einer quantenmechanischen Behandlung des Hamiltonian muß der Anisotropieterm bei der Einführung von Boseoperatoren

über die Holstein-Primakoff-Transformation gesondert behandelt werden. Damit die Matrixelemente mit den Boseoperatoren äquivalent zu den Matrixelementen zwischen den Zuständen des Hamiltonian mit einer Anregung und dem Vakuum sind, muß vor der Beschränkung auf quadratische Terme eine Normalordnung der Boseoperatoren vorgenommen werden (Lindgård und Danielsen 1974). Aus der Normalordnung folgt in niedrigster Ordnung ein Korrekturfaktor $\frac{1}{4}(2S-1)$ für den Anisotropieterm. Mit diesem Faktor ist auch die Bedingung erfüllt, daß die dynamischen Eigenschaften im Spezialfall $S=\frac{1}{2}$ unabhängig von der Anisotropie sein müssen. Wichtig für den hier interessierenden Fall $S=1$ ist, daß der wesentliche Unterschied zur klassischen Auswertung der Experimente (wegen $\frac{1}{4}(2S-1)=\frac{1}{2}$) allein in einer Verdopplung des Wertes der Anisotropie besteht. Darüber hinaus gehende Korrekturen (Lindgård und Kowalska 1976, Lovesey und Steiner 1981), vor allem wenn ein Magnetfeld zu berücksichtigen ist, sind nur gering und zudem noch nicht experimentell nachgewiesen. In diesem Sinne scheint es deshalb konsistent zu sein, Tieftemperatur-Phänomene von $CsNiF_3$ durch den Hamiltonian I.11 mit klassischen Spinvektoren zu beschreiben, wenn nur für J und A die oben angegebenen Werte aus der klassischen Behandlung verwendet werden (Mikeska 1979). Dieser Standpunkt wird auch in der vorliegenden Arbeit weitgehend angenommen.

Da trotz ihres großen Abstandes eine kleine Restwechselwirkung J' zwischen den ferromagnetischen Spinketten besteht, setzt bei einer Neéltemperatur $T_N = 2.61$ K eine antiferromagnetische Ordnung zwischen diesen Ketten ein. Die klassische Beschreibung ist damit auf Temperaturen $T > T_N$ beschränkt. Bei diesen Temperaturen sind dann auch die mit der Zwischenketten-Kopplung ($J'/J \approx 10^{-3}$) zusammenhängende Phänomene (Horovitz et al 1977, W.Koch 1980) ohne

Bedeutung und das 1D Modell I.11 ist gerechtfertigt.
Zunächst kann davon ausgegangen werden, daß die klassischen Vektoren bei nicht zu hohen Temperaturen auf die x-y-Ebene beschränkt sind. Wird durch Anlegen eines äußeren Magnetfeldes (z.B. in x-Richtung) die Rotationsinvarianz in dieser Ebene gebrochen, so liegt eine vergleichbare Situation wie bei dem Modell der Pendelkette (Kapitel 1) vor. Der Torsionskopplung entspricht die Austauschwechselwirkung und anstatt durch das Schwerefeld kommt die Nichtlinearität durch das Magnetfeld zustande. Austausch- und Zeeman-Energie

$$H_{stat} = -J \sum_n \vec{S}_n \vec{S}_{n+1} - g\mu_B B \sum_n S_n^x \qquad \text{I.11a}$$

($g = 2.4$), bestimmen auch die Ausdehnung des entsprechenden statischen Kinks, die in Einheiten der Gitterkonstante a durch $D^{CsNiF_3} = \left(\frac{JS^2}{g\mu_B BS}\right)^{1/2}$ charakterisiert ist (vgl. Kapitel I 2.1).
Für Experimente ist nur ein endlicher Bereich von Magnetfeldern der Größenordnung $B = 5\text{-}10$ kGauß relevant. Das liegt daran, daß zum einen bei zu kleinem Magnetfeld der nichtlineare Charakter von I.11a verloren geht, zum anderen aber die Dichte der Kinks wegen $E_K \propto B^{1/2}$ (vgl. Kapitel I 2.1) bei großen Magnetfeldern exponentiell klein wird.
Nicht alle experimentellen Resultate für $CsNiF_3$ lassen sich klassich interpretieren. Eine Ausnahme stellt beispielsweise die spezifische Wärme dar, an der darüberhinaus eine weitere typische Eigenschaft von 1D Systemen verdeutlicht werden kann. Fig. I.2 zeigt das experimentelle Resultat von Lebesque et al (1973). Die experimentelle Schwierigkeit bei der Bestimmung des magnetischen Anteils der spezifischen Wärme besteht in der Separierung des großen Gitter-Beitrages, da es keine diamagnetische, zu $CsNiF_3$

isomorphe Substanz gibt. Der magnetische Anteil zeigt ein breites Maximum, das für Systeme charakteristisch ist, die keinen Übergang zu einer langreichweitigen Ordnung bei endlicher Temperatur aufweisen. Demgegenüber ist mit dem dreidimensionalen Phasenübergang bei $T_N = 2.61$ K eine deutliche Spitze in der spezifischen Wärme verbunden. In gleicher Weise sind auch die Resonanzen

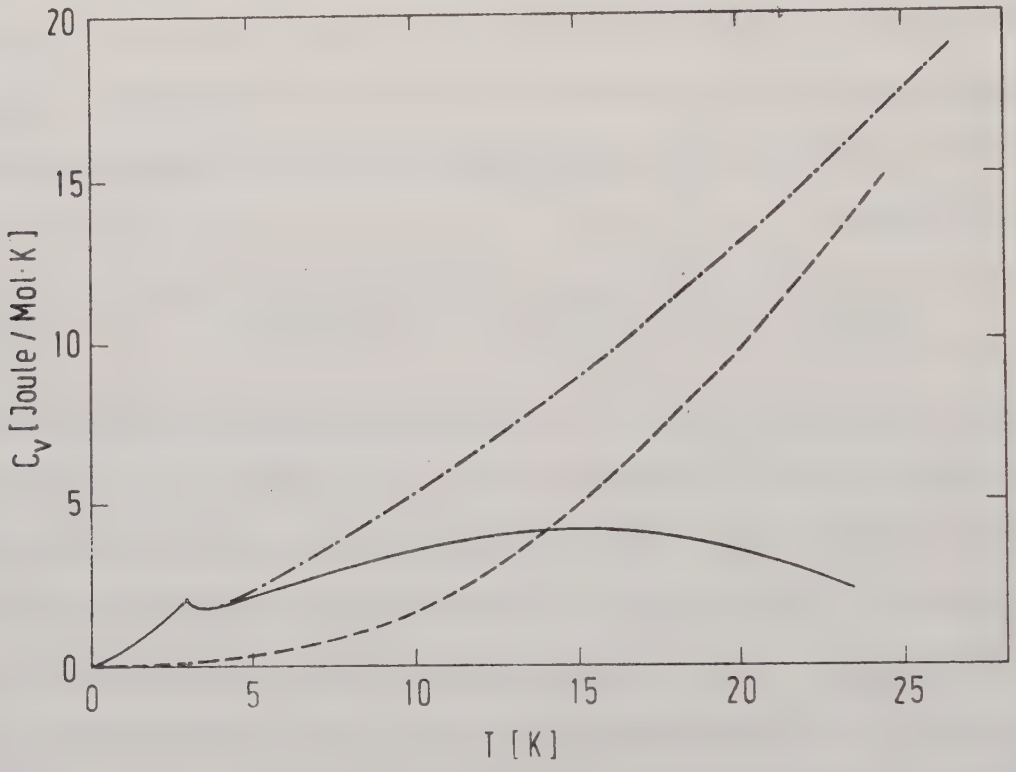


Fig. I.2 Gesamte spezifische Wärme von $CsNiF_3$ als Funktion der Temperatur (—·—·—·), Gitterbeitrag (- - - - - -) sowie Differenz zwischen gesamter spezifischer Wärme und Gitterbeitrag (————) aus Lebesque et al (1973)

der oben erwähnten Quasi-Spinwellen gegenüber dem Fall von Magnonen in einem dreidimensionalen System deutlich verbreitert. Das breite Maximum ist aber auch ein Ausdruck der kurzreichweitigen Ordnung innerhalb der Spinketten. Diese Ordnung führt dazu, daß die Entropie des magnetischen Systems bei $T = 0$ verschwindet. Andererseits sind die entsprechenden magnetischen Korrelationen auf $T \lesssim 50$ K beschränkt. Der Vergleich des experimentellen Ergeb-

nisses mit der spezifischen Wärme des klassischen 1D isotropen Heisenberg-Modells (Fisher 1964) sowie der entsprechenden Verallgemeinerung auf den Fall mit Anisotropie (Loveluck et al 1975) in Fig. I.3 zeigt, daß die klassische Beschreibung gerade das Verschwinden der Entropie für $T \to 0$ nicht liefert. Angesichts der Unsicherheit bei der Bestimmung der experimentellen Kurve als gut

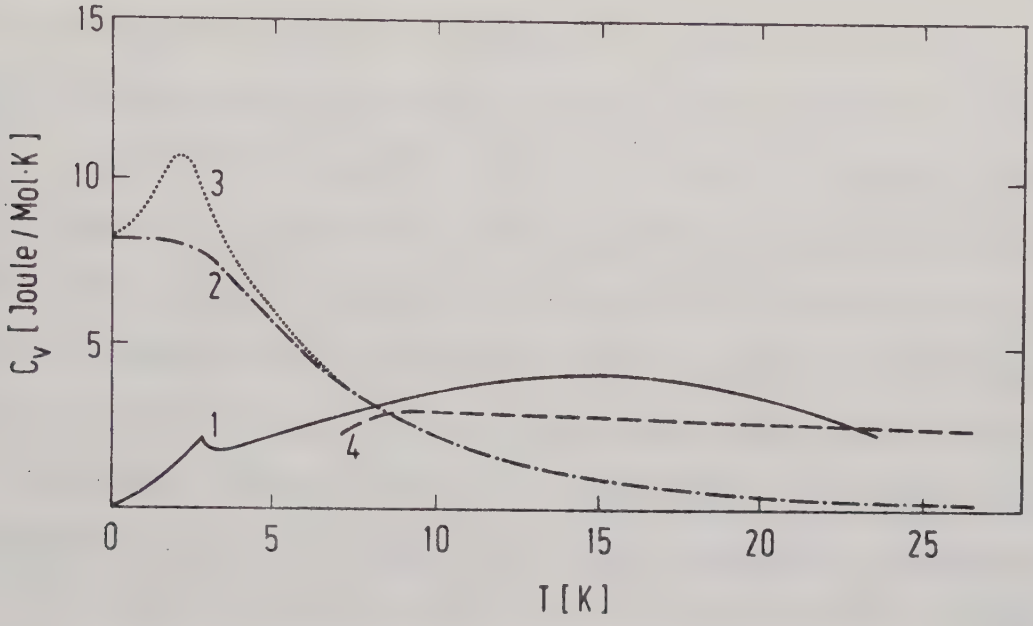


Fig. I.3 Vergleich der magnetischen spezifischen Wärme von $CsNiF_3$: (1) Experiment (Lebesque et al 1973), (2) klassisches isotropes (Fisher 1964) und (3) anisotropes (Loveluck et al 1975) Heisenberg-Modell sowie (4) anisotopes, quantenmechanisches Heisenberg-Modell (de Neef und de Jonge 1975). Man beachte, daß für (2) und (3) $A/k_B = 5$ K, für (4) hingegen aufgrund der quantenmechanischen Korrektur $A/k_B = 10$ K verwendet ist! Für große Temperaturen stimmen (2) und (3) überein.

zu bezeichnen ist dagegen die Übereinstimmung mit dem ebenfalls in Fig. I.3 gezeigten Ergebnis für ein 1D Quantensystem (de Neef und de Jonge 1975, siehe auch Bloete 1975). Die Kurve von de Neef und de Jonge ist das Resultat einer Extrapolation der numerisch bestimmten Ergebnisse für endliche Spinketten auf den Fall großer Kettenlänge. Auch die Suszeptibilität parallel zu den Spinketten (Dupas und Renard 1977) wird von der Quantentheorie wesentlich besser beschrieben als im Rahmen der klassischen Behandlung.

b) TMMC

Die Struktur dieses Materials stimmt im wesentlichen mit der von $CsNiF_3$ (Fig. I.1) überein, wobei Ni^{2+} durch Mn^{2+}, F^- durch Cl^- sowie Cs^+ durch den Komplex $(CH_3)_4N^+$ zu ersetzen ist. Die Chlor-Ionen vermitteln in diesem Fall eine antiferromagnetische Kopplung zwischen den Mn^{2+} - Ionen und anstelle der Ein-Ionen-Anisotropie in $CsNiF_3$ ist in TMMC eine Anisotropie dipolaren Ursprungs zu berücksichtigen. Die in Vergleich zu $CsNiF_3$ kleine Neéltemperatur $T_N = 0.85$ K, die aus einer entsprechend geringeren Zwischenketten-Kopplung ($|J'|/|J| \approx 1.5\ 10^{-5}$) resultiert, erklärt sich aus der sehr viel größeren Ausdehnung des $(CH_3)_4N^+$ - Komplexes verglichen mit der der Cs^+ - Ionen. Da die Mn^{2+} - Ionen einen großen Spinwert $S = \frac{5}{2}$ aufweisen, kann davon ausgegangen werden, daß TMMC oberhalb 1 K als sehr gute Realisierung eines 1D klassischen Systems aufgefaßt werden kann. Unter Berücksichtigung eines zusätzlichen Magnetfeldes lautet die Hamiltonfunktion (Regnault et al 1982):

$$H = \sum_n \{ 2\tilde{J}\, \vec{s}_n \vec{s}_{n+1} - 2\tilde{D}\, s_n^z s_{n+1}^z - \tilde{H}\, s_n^x \} \qquad \text{I.12}$$

mit $|\vec{s}_i| = 1$, $\tilde{J} = JS^2 = 42.5\ k_B$, $\tilde{D} = 1\ k_B$ und $\tilde{H} = g\,\mu_B BS$. Durch die Anisotropie ist wie im Falle von $CsNiF_3$ für die Spins eine Stellung in der x-y-Ebene begünstigt. Einen zu I.11a vergleichbaren Ausdruck gewinnt man durch Elimination eines der beiden Untergitter in I.12 mit Hilfe des sogenannten "Dezimierungs-Verfahrens" (Villain und Loveluck 1977, Borsa et al 1978). Wesentliches Resultat bei tiefen Temperaturen ist eine effektive ferromagnetische Kopplung $-\tilde{J}$ zwischen den verbleibenden Spins anstelle der Kopplung $2\tilde{J}$ und aus dem Magnetfeld resultiert eine effektive Anisotropie

$$H^{eff}_{stat} = -\tilde{J} \sum_n \vec{s}_{2n} \vec{s}_{2n+2} + \frac{\tilde{H}^2}{8\tilde{J}} \sum_n (s^x_n)^2 \qquad \text{I.13}$$

Damit ist der Anschluß an den ferromagnetischen Fall hergestellt, wobei das Magnetfeld in TMMC die Nichtlinearität über den Anisotropieterm bestimmt. Den Zusammenhang mit der entsprechenden SG-Gleichung findet man z.B. bei Maki (1980). Für das Weitere interessieren nur die zwei wesentlichen Unterschiede von I.13 in Vergleich zu I.11a. Zum einen ist die Kink-Ausdellung durch $D^{TMMC} \propto J/B$ charakterisiert, wesentlicher ist jedoch, daß die Spins im Grundzustand von I.13' entweder in Richtung der positiven oder der negativen y-Achse stehen. Damit unterscheiden sich die Vakua um Vielfache des Winkels π. Formal kann man dieses System auf das SG-Modell abbilden, bei dem sich die Vakua ja um $n \cdot 2\pi$ unterscheiden, indem man den doppelten Winkel zwischen Spins und y-Achse als Variable betrachtet. Der 2π-Kink der SG-Theorie beschreibt dann im realen System gerade eine Drehung um 180^o, er stellt also eine sogenannte π-Domänenwand dar.

I 3.2 Blochwände in 3D Materialien

Die zeitabhängige SG-Gleichung wurde zuerst von Enz (1964) als vereinfachtes Modell für die Beschreibung der Bewegung von Blochwänden in 3D uniaxialen Ferromagneten verwendet. Der Reduktion des 3D Systems auf ein effektives 1D Problem liegt die Annahme einer ebenen Blochwandkonfiguration zugrunde. Betrachtet wird dann die Bewegung einer Blochwand entlang einer Spinkette mit uniaxialer Anisotropie senkrecht zur Kettenrichtung. Die statische Kink-Konfiguration bestimmt sich aus

$$H_{stat} = -J \sum_n \vec{S}_n \vec{S}_{n+1} - \tilde{A} \sum_n (S_n^y)^2 \qquad \text{I.14}$$

Zu beachten ist, daß die uniaxiale Anisotropie in y-Richtung eine sogenannte "leichte" Magnetisierungsrichtung festlegt. Der Anisotropieterm in I.14 ist deshalb in Gegensatz zu dem in x-Richtung bei Gleichung I.13 negativ und der Grundzustand stimmt in beiden Fällen überein. Wie im Falle von TMMC beschreibt daher das SG-Soliton eine π-Domänenwand, deren Breite hier von $D^{ENZ} \propto \left(\frac{J}{\tilde{A}}\right)^{1/2}$ abhängt. Nur die durch I.14 beschriebene Situation ist gemeint, wenn im folgenden von Blochwänden die Rede ist und entsprechende Ergebnisse für Blochwände herangezogen werden.

I 4 Diskrete Modellsysteme und numerische Simulation

Nur in den wenigsten Fällen, wie beispielsweise dem mechanischen Analog-Modell für die SG-Gleichung (Kapitel I 2.1), lassen sich Solitonen direkt experimentell nachweisen bzw. deren Eigenschaften, wie die gegenseitige Streuung, verifizieren (Scott et al 1969, Nakajima et al 1974, Cirillo et al 1981). Häufiger, so auch in den für die vorliegende Arbeit wichtigen Systemen, machen sich die Solitonen dagegen nur indirekt, beispielsweise durch einen zentralen Peak im Strukturfaktor bemerkbar. In diesen Fällen ist die numerische Simulation der Bewegungsgleichungen ein geeignetes Mittel zur Überprüfung von Modellvorstellungen. Die räumliche Diskretisierung der partiellen Differentialgleichungen ist dabei ein wesentliches Merkmal der Computersimulation der nichtlinearen Dynamik. Es ist immer möglich, Lösungen der Kontinuumsgleichung durch willkürliche Verringerung der Diskretisierungslänge mit be-

liebiger Genauigkeit zu reproduzieren.

In den vorliegenden physikalischen Anwendungen ist die Situation jedoch umgekehrt. Die Kontinuumsgleichung ist eine Näherung für die Bewegungsgleichungen eines diskreten Modellsystems. Es ist daher naheliegend, direkt die Bewegungsgleichungen des diskreten Systems für die numerische Simulation zu verwenden. Damit stellt die Gitterkonstante jeweils die natürliche Diskretisierungslänge dar und die diskrete Translationssymmetrie ist ein realer Aspekt des Problems. Die daraus resultierenden Abweichungen von den Kontinuumsresultaten sind für die folgenden Abschnitte, insbesondere auch für die Simulation der Solitonendynamik wichtig und seien deshalb zunächst zusammengefaßt. Im Vordergrund stehen dabei die Eigenschaften des einzelnen Solitons im diskreten System. Zur Integrabilität ergaben sich ja schon Hinweise aus MD Simulationen des diskreten SG-Modells (Kapitel I 2.3).

Die räumliche Disretisierung

$$\varphi(z) \quad \rightarrow \quad \varphi_n \qquad \text{I.15a}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \quad \rightarrow \quad \frac{\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1} - 2\varphi_n}{a^2} \qquad \text{I.15b}$$

der partiellen Differentialgleichung I.1 führt auf ein System gekoppelter gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial t^2} = - \frac{\partial H}{\partial \varphi_n} , \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \qquad \text{I.16}$$

welches bei Übereinstimmung der Diskretisierungslänge a mit der Gitterkonstante eines diskreten Modellsystems gerade den gekoppelten Bewegungsgleichungen dieses Systems entspricht. In der zur Hamiltondichte I.2 entsprechenden diskreten Form des Hamiltonian für das SG-Modell

$$H = aA \sum_n \{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi_n}{\partial t} \right)^2 + \frac{C}{2} f_{SG}(\varphi_n, \varphi_{n+1}) + B (1 - \cos \varphi_n) \} \qquad \text{I.17}$$

ist dabei die zu I.15b entsprechende Ersetzung in I.2

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 \rightarrow \left(\frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{a} \right)^2 \equiv f_{SG} \qquad \text{I.18}$$

zu berücksichtigen. In den magnetischen Modellsystemen gilt die aus der Austauschwechselwirkung herzuleitende Form I.18 jedoch nur für $|\frac{\varphi_n - \varphi_{n+1}}{a}| << 1$. Im diskreten System mit beliebiger Winkeldifferenz ist daher f_{SG} durch

$$f_{2\Pi} = 2 (1 - \cos (\varphi_n - \varphi_{n+1})) \qquad \text{I.19a}$$

bzw.

$$f_{\Pi} = 2 (1 - \cos (\frac{\varphi_n - \varphi_{n+1}}{2})) \qquad \text{I.19b}$$

zu ersetzen, je nachdem ob die Substanz ein 2π- oder ein π-Soliton erlaubt (Kapitel I 3). Das Gleichungssystem I.16 mit dem entsprechenden Ausdruck I.19 ist Ausgangspunkt der numerischen Simulation.

Als Folge der diskreten Translationssymmetrie hängt die potentielle Energie des Solitons im diskreten System von der Position seines Schwerpunktes ab. Im diskreten φ^4 - Modell ebenso wie im SG-Modell, aber auch in Modellen für Blochwände, die davon gemäß I.19a,b abweichen, wird die potentielle Energie minimal, wenn der Schwerpunkt des Solitons symmetrisch zwischen zwei Gitterplätzen liegt. Die potentielle Energie ist dagegen maximal, wenn der Schwerpunkt mit einem Gitterplatz übereinstimmt. Die Differenz zwischen Maximum und Minimum stellt eine Potentialbarriere für die Bewegung des Solitons im Kristall dar, die auch als Peierls-Potential bezeichnet wird. Da nun die Magnetisierungsumkehr einzelner Bereiche eines Materials mit Multi-Domänen-Struk-

tur gewöhnlichder Verschiebung von Blochwänden zugeschrieben wird, wurde das Peierls-Potential zur Erklärung der intrinsischen (d.h. der Defekt- und Verunreinigungs- unabhängigen) Koerzitivkraft in Materialien mit schmalen Blochwänden verwendet (Zijlstra 1970, van der Broeck und Zijlstra 1971, Egami und Graham 1971, Hilzinger und Kronmüller 1972, 1973). Dabei ist zu berücksichtigen, daß für schmale Solitonen zunehmende Abweichungen von der Kontinuumsform I.6a speziell im Bereich des Solitonen-Schwerpunktes auftreten, da dort die Winkeldifferenzen nicht mehr klein sind. Die statische Solitonenkonfiguration $(\frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial t^2} \equiv 0)$ ist dann im allgemeinen numerisch aus dem unendlichen Differenzengleichungssystem I.16 zu bestimmen (Hubert 1974). Praktisch kann das System jedoch für eine hinreichend große Zahl von Gleichungen endlich gemacht werden, indem für die Ränder die asymptotischen Werte angenommen werden. Zur Illustration ist die numerisch bestimmte statische Solitonkonfiguration für das planare Modell mit einem Austauschterm der Form I.19a für $d = 1.45a$ im Vergleich zur Kontinuumsform I.6a in Fig.I.4 dargestellt. Dabei wurde das von Hubert (1974) beschriebene Newtonsche Verfahren auf der Basis von 101 Spins verwendet. Deutlich treten die angesprochenen Abweichungen vom Kontinuumsresultat im Bereich des Schwerpunktes hervor. Die Flanken des Solitons sind jeweils in Richtung zum Zentrum hin verschoben und die Breite des Solitons ist damit kleiner. Die Flanken werden jedoch gut von der Kontinuumslösung beschrieben, da in diesem Bereich die Winkeldifferenzen zwischen benachbarten Gitterplätzen wieder hinreichend klein sind. Die Methoden zur numerischen Bestimmung des Solitonenprofils läßt sich daher verbessern. Durch die Annahme des Kontinuumverlaufs in entsprechender Entfernung kann nämlich die Zahl der Gleichungen drastisch reduziert werden.

Da die Gesamtenergie erhalten ist, führt die räumlich periodische potentielle Energie bei bewegten Solitonen zu einer Modulation der Solitonengeschwindigkeit mit charakteristischer Frequenz.

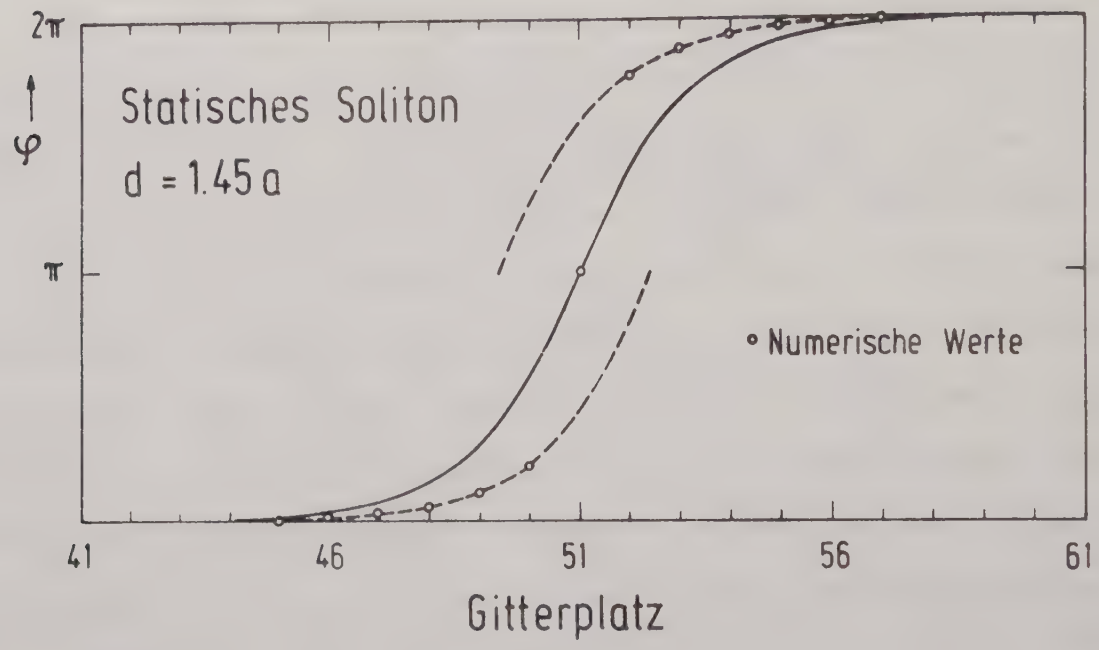


Fig. I.4 Statisches SG-Soliton mit d = 1.45a (durchgezogene Kurve) in Vergleich zu den numerisch bestimmten Werten (°).

Dabei werden ständig Magnonen erzeugt und die Bewegung wird gedämpft. Wird das Soliton zu langsam um die Potentialbarriere zu überwinden, kann es nicht mehr im System propagieren und der Schwerpunkt oszilliert zwischen zwei benachbarten Gitterplätzen. Das dynamische Verhalten von schmalen Solitonen läßt sich also qualitativ verstehen, wenn man das Soliton als Teilchen in einem periodischen Potential auffaßt. Das dynamische Verhalten wird allerdings erst für $d \lesssim a$ wesentlich vom Peierls-Potential beeinflußt. Das hängt damit zusammen, daß die Peierlsbarriere exponentiell mit $\frac{d}{a}$ verschwindet (Hilzinger und Kronmüller 1973,

Prelovšek und Sega 1981):

$$\Delta E_{Peierls} \propto e^{-\pi^2 d/a} \qquad I.20$$

Für das SG-Modell wurde das beschriebene dynamische Verhalten von Currie et al (1977) numerisch bestätigt. Auch zur Abschätzung der intrinsischen Koerzitivkraft wurde das SG-Modell herangezogen (Bishop und Lewis 1979), wobei die Peierlsbarriere aus dem niedrigsten Eigenwert des Mesonenspektrums, der im Kontinuumslimes in die Goldstone-Mode verschwindender Energie übergeht, abgeschätzt wird. Die nur geringen quantitativen Abweichungen von den Resultaten mit I.19b (Zjilstra 1970) zeigen, daß die spezielle Form des Austauschterms für die geschilderten Resultate ohne Bedeutung ist.

Aus der Abschätzung I.20 folgt nun für die 1D Systeme $CsNiF_3$ und TMMC, daß die Diskretheitseffekte durch Variation des Magnetfeldes weitgehend ausgeschlossen werden können. Bei Blochwänden liegen dagegen die Parameter im allgemeinen fest und in einigen Materialien scheint die intrinsische Koerzitivität aufgrund schmaler Blochwände wirklich eine Rolle zu spielen (Egami und Graham 1971, Hilzinger und Kronmüller 1972, 1973, Bishop und Lewis 1979). Die numerische Simulation unter der Annahme $d >> a$ gestattet es aber zunächst immer, die geschilderten Diskretheitseffekte von anderen Effekten zu trennen. Liegen Verunreinigungen im Material vor, so kann das Austauschintegral jedoch zumindest lokal sehr klein werden und die diskrete Natur des Modells wird trotz $d >> a$ wichtig (Abschnitt IV). Die in diesem Kapitel angesprochenen Behandlungsmethoden lassen sich dann weitgehend übertragen.

Abschließend sei darauf hingewiesen, daß sich wie bei Verunreinigungen die diskrete Natur des Gitters auch im Spektrum der Mag-

nonen unabhängig von der Solitonenbreite manifestiert (Theodorapoulos 1980). Magnonen vom Rand der Brillouinzone werden am Soliton reflektiert, das damit nicht vollständig transparent ist. Daß die Transparenz-Eigenschaft des Solitons nur von untergeordneter Bedeutung ist, wurde bereits in Kapitel I 2 diskutiert. Die Magnonenreflexion spielt bei tiefen Temperaturen wegen der geringen thermischen Besetzung der entsprechenden Zustände aber auch für die Dämpfung der Solitonenbewegung keine Rolle.

II Erweitertes Band von Solitonen in planaren Ferromagneten

Das Problem der Identifikation von Solitonenbeiträgen zum dynamischen Strukturfaktor des planaren Ferromagneten $CsNiF_3$ in einem symmetriebrechenden äußeren Magnetfeld ist in letzter Zeit von großem experimentellen und theoretischen Interesse. Ursprünglich wurde der zentrale Peak im longitudinalen Strukturfaktor $S_{\parallel}(q,\omega)$ mit dem von Mikeska (1978) im Rahmen des klassischen SG Modells berechneten Solitonen-Beitrag identifiziert (Kjems und Steiner 1978). Diese Zuordnung wurde jedoch in Frage gestellt, da auch Zwei-Magnonen-Differenzprozesse (gleichzeitige Erzeugung und Vernichtung jeweils eines Magnons) einen Beitrag zu diesem quasi-elastischen Peak liefern (Allroth und Mikeska 1980). Eine quantenmechanische Rechnung für die Magnonen allein zeigt neben der qualitativen Übereinstimmung mit den Ergebnissen der klassischen Beschreibung von Allroth und Mikeska, daß die Beiträge von Solitonen und Zwei-Magnonen-Differenzprozessen unter der Annahme wechselwirkungsfreier Magnonen von gleicher Grössenordnung sind (Reiter 1981).

In neueren Experimenten von Steiner et al (1982) wurden die transversalen Spinfluktuationen untersucht, zu denen die Zwei-Magnonen-Prozesse nicht beitragen. Diese Ergebnisse scheinen nun zu zeigen, daß es wirklich einen Beitrag von der Streuung an thermischen, Soliton-ähnlichen Anregungen zum quasi-elastischen Peak gibt. Das Resultat steht in Einklang mit den Ergebnissen der MD-Simulation von Schneider und Stoll (1981) für das SG Modell, wo sich Soliton-Eigenschaften ebenfalls nicht im longitudinalen, sondern im transversalen Strukturfaktor zeigen (Abschnitt I 2.3).

Einen Hinweis auf die Existenz nichtlinearer Anregungen ergeben

auch die Messungen von spezifischer Wärme im Magnetfeld (Ramirez und Wolf 1982), sowie Kernspin-Relaxationszeit (NMR) (Goto und Yamaguchi 1981, Seitz et al 1983) .

Daß sich jedoch die Solitonen im Rahmen eines SG Modells beschreiben lassen, wurde von Loveluck et al (1980) in Frage gestellt. Wegen des niedrigen Spinwertes S=1 ist bei $CsNiF_3$ die Annahme einer klassischen Gleichverteilung nur bei so hohen Temperaturen gültig, bei denen die in der SG-Beschreibung als vernachlässigbar angenommenen Spinfluktuationen aus der Ebene leichter Magnetisierung heraus groß sind. In diesem Sinne scheinen sich die für die klassische bzw. die SG-Beschreibung notwendigen Näherungen gegenseitig auszuschließen. Loveluck et al (1980) schließen entsprechend aus den Ergebnissen ihrer Transfermatrix- und Molekulardynamik-Rechnungen, daß der planare Ferromagnet bei experimentell relevanten Parametern eher Eigenschaften des isotropen Heisenberg- als des SG-Modells aufweist. Weitere Hinweise darauf, daß die SG Beschreibung nicht ausreicht, liefert die Abweichung der experimentell bestimmten spezifischen Wärme (Ramirez und Wolf 1982) von der theoretischen Vorhersage (Currie et al 1980). Darüberhinaus sind die aus den Experimenten zu ermittelnden Werte für die Aktivierungsenergie um 20-30% kleiner als der theoretische Wert für die Solitonenenergie von Mikeska (1978), was ebenfalls noch einer Klärung bedarf.
Bei hohen Temperaturen lassen sich die Eigenschaften des planaren Ferromagneten durch ein isotropes Heisenberg-Modell beschreiben. Entsprechend ist bei fester Temperatur und abnehmender Anisotropie ein kontinuierlicher Übergang zum isotropen Modell zu erwarten. Es ist daher sinnvoll, den Einfluß der in der SG-Theorie vernachlässigten Terme auf Form und Dynamik der Solitonen als

Funktion der Stärke der Anisotropie zu untersuchen. In diesem Abschnitt wird ein Variationsansatz vorgestellt (Liebmann et al 1983), der es gestattet, Solitonen über den in bisherigen Arbeiten behandelten Bereich hinaus zu untersuchen. Man findet eine kontinuierliche Erweiterung des Bandes von Solitonen vom planaren SG-Limes zu einem neuen Regime nichtlinearer Anregungen mit niedriger Energie und kleiner Amplitude (d.h. beschränkter Abweichungen der Spins vom Grundzustand). Als Folge der fehlenden Galilei-Invarianz der Bewegungsgleichung ist die Form der Solitonen explizit von der Geschwindigkeit abhängig. Die Erweiterung des Solitonen-Bandes ist eine Konsequenz der Tatsache, daß bei endlicher Anisotropie der topologische Erhaltungssatz der SG-Theorie im dreidimensionalen Spinraum nicht gilt. Das Solitonen-Band wird durch numerische Simulation der Spindynamik bestätigt. Im planaren Limes werden dabei die bisher bekannten Ergebnisse reproduziert. Die Amplitude der neuen Lösungen nimmt mit wachsender Geschwindigkeit ab. Außerdem ist die Bewegung der Spins nicht mehr auf die Ebene leichter Magnetisierung beschränkt. Diese Solitonen ähneln damit den entsprechenden Anregungen des isotropen Heisenberg-Modells. Die Form des Solitonen-Bandes hängt in charakteristischer Weise von dem Verhältnis der Anisotropie-Energie zur Zeeman-Energie ab. Zu festem Magnetfeld ergibt sich mit abnehmender Anisotropie der erwähnte kontinuierliche Übergang vom planaren Ferromagneten zum isotropen Heisenberg-Modell. Obwohl noch keine vollständige thermodynamische Beschreibung für die Anregungen des erweiterten Solitonen-Bandes vorliegt, ergeben sich Hinweise darauf, warum in den Experimenten Soliton-artige Eigenschaften, wie sie die SG-Theorie beschreibt, nachweisbar sind.

Diskutiert wird schließlich auch, in welchem Maße diese Eigenschaften durch das von Loveluck et al (1980) angesprochene isotrope Heisenberg-Modell erklärt werden können.

II 1.1 Die Bewegungsgleichung

Für die Untersuchungen dieses Abschnittes ist die Notation von Magyari und Thomas (1982) zweckmäßig. Für klassische Spins $\vec{S}_n = S\,\vec{s}_n$ mit konstanter Länge S ($\vec{s}_n\,\vec{s}_n = 1$) läßt sich damit der Hamiltonian des 1D planaren Ferromagneten in der Form

$$H = \frac{a}{\delta_o} \sum_n \{-\left(\frac{\delta_o}{a}\right)^2 \vec{s}_n \vec{s}_{n+1} + \frac{1}{2} s_{n,z}^2 + b(1-s_{n,x})\} \qquad \text{II.1}$$

schreiben, wobei die Energie in Einheiten von $E^* = S^2(2AJ)^{1/2}$ gegeben ist. $b = B/B_A$ bezeichnet das Magnetfeld in Einheiten des Anisotropiefeldes $B_A = 2AS/g\mu_B$ (54 kG für $CsNiF_3$) und $\delta_o = a(J/2A)^{1/2}$ ist eine mit der Gitterkonstante a zusammenhängende charakteristische Länge. Die Bewegung der Spins wird durch die Landau-Lifshitz-Gleichung (Landau und Lifshitz 1935) beschrieben, die mit Zeit in Einheiten von $t_o = \hbar/2AS$ die Gestalt

$$\frac{\partial \vec{s}_n}{\partial t} = -\vec{s}_n \times \frac{\partial H}{\partial \vec{s}_n} \qquad \text{II.2}$$

hat. Diese Gleichung beschreibt die Präzession der Spins in einem ortsabhängigen, effektiven Magnetfeld proportional zu $\frac{\partial H}{\partial \vec{s}_n}$. Während die diskrete Form von Gl. II.2 für die numerische Simulation verwendet wird, ist die Kontinuumsbeschreibung $\vec{s}_n(t) \to \vec{s}(z,t)$ für die Variationsrechnung angemessen. Mit Länge in Einheiten von δ_o ergibt sich in der Kontinuumsnäherung für II.1 und II.2 das Energiefunktional

$$E\{\vec{s}\} = \int_{-\infty}^{+\infty} \{\frac{1}{2}\,\vec{s}'^{\,2} + \frac{1}{2}\,s_z^{\,2} + b(1-s_x)\}dz \qquad \text{II.3}$$

bzw. die Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial \vec{s}}{\partial t} = \vec{s} \times (\vec{s}'' - \frac{1}{2}\,s_z\,\vec{e}_z + b\,\vec{e}_x) \qquad \text{II.4}$$

wobei der Strich jeweils die partielle Ableitung $\partial/\partial z$ bezeichnet. In den hier verwendeten Einheiten hängt damit die Spindynamik nur noch über b von den Modellparametern ab. Für die interessierenden solitären Wellen ist $\vec{s}$ lediglich eine Funktion von $Z = z - ut$ mit der Geschwindigkeit u in Einheiten von $u_o = \delta_o/t_o = aE^*/\hbar S$ und es gilt: $\frac{\partial}{\partial z} = \frac{d}{dZ}$, $\frac{\partial}{\partial t} = -u\,\frac{d}{dZ}$. Für die spezielle Form der solitären Wellen ist die Bewegungsgleichung II.4. die Euler-Lagrange-Gleichung des Funktionals (Magyari und Thomas 1982)

$$K\{\vec{s}\} = E\{\vec{s}\} + u\,F\{\vec{s}\} \qquad \text{II.5}$$

mit

$$F\{\vec{s}\} = \int_{-\infty}^{+\infty} s_z\,\frac{\partial}{\partial Z}\,(\arctan\frac{s_y}{s_x})\,dZ \qquad \text{II.6}$$

F entspricht gerade dem Gesamtimpuls der solitären Welle. K ist damit das Variationsfunktional für die Extremalisierung der Energie der solitären Welle unter der Nebenbedingung eines konstanten Gesamtimpulses, wobei der entsprechende Lagrangeparameter die Geschwindigkeit u des Solitons ist (Tjon und Wright 1977).

Für einen Variationsansatz, der von N Parametern $\{\alpha_i\}$, i=1,2,...,N, abhängt und zweckmäßigerweise so zu wählen ist, daß K explizit als Funktion dieser Parameter angegeben werden kann, reduziert sich die Bewegungsgleichung II.4 auf ein System gekoppelter, alge-

braischer Gleichungen

$$0 = \frac{\partial K(\{\alpha_i\})}{\partial \alpha_j} = \frac{\partial E(\{\alpha_i\})}{\partial \alpha_j} + u \frac{\partial F(\{\alpha_i\})}{\partial \alpha_j} \qquad \text{II.7}$$

Aus diesem Gleichungssystem kann dann alle notwendige Information gewonnen werden.

II.1.2 SG-Limes und Stabilität

Im allgemeinen wird bei der Behandlung der Bewegungsgleichung die Richtung des Spinfeldes $\vec{s}(Z)$ durch $\vec{s} = (\cos\theta\cos\varphi, \cos\theta\sin\varphi, \sin\theta)$ in sphärischen Polarkoordinaten dargestellt. Der Azimutwinkel φ ($0 \leq \varphi \leq 2\pi$) beschreibt dabei den Winkel zwischen der Richtung des Magnetfeldes und der Projektion von $\vec{s}$ in die Ebene leichter Magnetisierung, θ ($|\theta| < \frac{\pi}{2}$) den Winkel zwischen $\vec{s}$ und dieser Ebene (Fig. II.1).

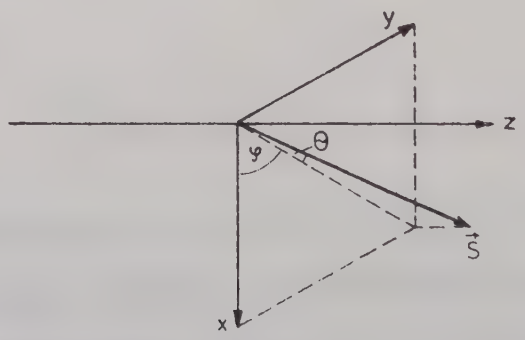


Fig. II.1 Definition der sphärischen Polarkoordinaten

In dieser Darstellung folgen für II.4 Bewegungsgleichungen der Form

$$-u\,\theta' = \varphi''\cos\theta - 2\,\theta'\varphi'\sin\theta - b\sin\varphi \qquad \text{II.8a}$$

$$u\,\varphi'\cos\theta = \theta'' + (\varphi'^2 - 1)\sin\theta\cos\theta - b\cos\varphi\sin\theta \qquad \text{II.8b}$$

Unter der Annahme $|\theta| << 1$ kann man sich in II.8 auf Terme linear in θ beschränken. Für räumlich gering variierende Winkel und kleine Magnetfelder können dann diese Gleichungen durch adiabatische Elimination von θ über die aus II.8b folgende Beziehung

$$\theta = \frac{\partial \varphi}{\partial t} = - u \varphi' \qquad \text{II.9}$$

näherungsweise auf die SG-Gleichung

$$\varphi'' - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = b \sin \varphi \qquad \text{II.10}$$

abgebildet werden (Mikeska 1978, $m_o^{-1} = \delta_o b^{-1/2}, \omega_o = b^{-1/2} t_o^{-1}$, $c_o = u_o$). Die Abbildung von II.8 auf eine lorentzinvariante Bewegungsgleichung ist dabei sicher ein Artifakt der Näherung. Da die Landau-Lifshitz-Gleichung II.4 noch nicht einmal galileiinvariant ist, ist im Gegensatz zur reinen Lorentz-Kontraktion eher eine Änderung der Form der Solitonen bei einer Änderung der Geschwindigkeit zu erwarten. Schon bei Berücksichtigung von Termen zweiter Ordnung in θ ergeben sich nicht-kovariante Beiträge zu II.10, selbst wenn die Beziehung II.9 beibehalten wird.(Riseborough et al 1981).

Neuere Untersuchungen zur Dynamik der Solitonen des planaren Ferromagneten im Rahmen der allgemeinen Bewegungslgeichungen II.8 haben nun gezeigt (Magyari und Thomas 1982, Kumar 1982), daß eine deutliche Bewegung der Spins aus der Ebene leichter Magnetisierung heraus berücksichtigt werden muß. Daher ist sowohl die Annahme kleiner θ-Werte als auch die adiabatische Elimination (Gl.II.9) aufzugeben. Daneben haben diese Autoren aus dem bis zur zweiten Ordnung in den Abweichungen von der jeweiligen Soliton-Lösungen entwickelten Funktional K (Gl. II.5) auf eine "energetische In-

stabilität" der Solitonen geschlossen. Danach soll das statische Soliton bei einem kritischen Magnetfeld $b_c = 1/3$ instabil gegen eine Formänderung bezüglich θ werden. Der Begriff "Instabilität" ist in diesem Zusammenhang jedoch irreführend, da im Sinne einer dynamischen Stabilitätsanalyse die um die statische Lösung linearisierte Bewegungsgleichung II.4 zu untersuchen ist. Tatsächlich liefert diese Stabilitätsanalyse nicht die in Verbindung mit einer Instabilität zu erwartende "Soft-Mode" für $b \to b_c$ (Magyari und Thomas 1983 a, Mikeska 1982). Im Gegensatz zu der in Zusammenhang mit Verunreinigungen auftretenden Instabilität(vgl. Abschn.IV) scheint vielmehr das kritische Magnetfeld allein dadurch gekennzeichnet zu sein, daß für dieses Feld eine infinitesimale Formänderung nicht mit einer Geschwindigkeitsänderung verbunden ist. Das entsprechende kritische Magnetfeld $b_c(u)$ für propagierende Solitonen nimmt mit wachsender Geschwindigkeit ab. Umgekehrt entspricht dem kritischen Punkt bei vorgegebenem Magnetfeld eine kritische Geschwindigkeit $u_c(b)$, die mit wachsendem Magnetfeld abnimmt. Diese kritische Geschwindigkeit ist von Magyari und Thomas (1982) numerisch bestimmt worden.

Wie im statischen Fall so ist das Funktional K(Gl. II.5) generell für eine Stabilitätsanalyse ungeeignet. Unabhängig davon ist der kritische Punkt jedoch ein exaktes Resultat, das von der SG-Theorie nicht reproduziert wird. Numerische Simulationen von Wysin et al (1982) haben angedeutet, daß sich die dynamische Stabilität der Solitonen am kritischen Punkt nicht ändert. Neben der Bestimmung der Soliton-Lösungen im Rahmen der vollständigen Bewegungsgleichung II.4 ist es damit aber auch sinnvoll, diese Lösungen sowie deren Stabilität über den bisher behandelten Bereich $u < u_c$ hinaus zu untersuchen, zumal u_c bei experimentell relevanten Magnetfel-

dern klein gegen 1 ist. Überdies ist noch nicht geklärt, welche allgemeinen Lösungen die vollständige Bewegungsgleichung II.4 erlaubt.

II 2 Exakte Resultate

II 2.1 Statische Lösungen

Mit $\theta = 0$ reduziert sich II.8a auf die statische SG-Gleichung für den Azimutwinkel φ. Das statische SG-Soliton

$$\varphi = 4 \tan^{-1} \exp\left(\frac{z}{\delta}\right) \qquad \text{II.11}$$

mit $\delta = b^{1/2}$ ist also eine exakte Lösung der Bewegungsgleichung II.4. Die entsprechende Ruheenergie ist in den Einheiten dieses Abschnittes durch $E_o = 8b^{1/2}$ gegeben. Da alle Spins in der Ebene leichter Magnetisierung liegen, ist die Konfiguration II.11 unabhängig von der Anisotropie. Bei Berücksichtigung der in Abschnitt II.1.1 eingeführten Länge- und Energieeinheiten δ_o bzw. E^*, ergeben sich die entsprechenden von A unabhängigen Ausdrücke für die charakteristische Ausdehnung ($2\delta\delta_o = a(\frac{JS}{g\mu_B B})^{1/2}$) und die Ruheenergie ($E^*E_o = 8S^2(g\mu_B BJ)^{1/2}$) des SG-Solitons.

Weitere exakte Lösungen folgen aus $\varphi \equiv 0$. II.8b hat dann die Form

$$0 = \theta'' - \sin\theta\cos\theta - b\sin\theta \qquad \text{II.12}$$

Für verschwindendes Magnetfeld ($b = 0$) folgt dann wieder die statische SG-Gleichung. Variable ist in diesem Fall 2θ und im Gegensatz zu II.11 beschreibt die entsprechende Lösung daher eine Drehung über die Anisotropierichtung in Form eines π-Kinks

$(0 \leq \theta \leq \pi)$:

$$\sin\theta = \operatorname{sech}\left(\frac{z}{\delta}\right) \qquad \text{II.13a}$$

Für infinitesimales Magnetfeld ist diese Lösung instabil, da dann $\theta = \pi$ nur noch ein relatives Minimum darstellt. Für endliches b ist II.12 identisch mit der "Doppel-SG"-Gleichung. Die resultierende Lösung hat die Form

$$\tan\frac{\theta}{2} = \pm \left\{\frac{b}{b+1}\right\}^{1/2} \operatorname{cosech}\left((b+1)^{1/2}\ \frac{z}{\delta}\right) \qquad \text{II.13b}$$

und beschreibt einen 2π-Kink, der die absoluten Minima $\theta = 0$ und $\theta = 2\pi$ verbindet. Ungeachtet der Frage nach der Stabilität dieses Solitons (im Prinzip kann diese Lösung durch eine Drehung der Spins in der x-y-Ebene zerstört werden), ist für relevante Magnetfelder die entsprechende Energie jedoch sehr viel größer als die SG-Ruheenergie (z.B. $2.5E_o$ für b = o.1). Für tiefe Temperaturen spielt sie damit keine Rolle und kann deshalb von den weiteren Betrachtungen ausgeschlossen werden.

II 2.2 Asymptotik

Den Mesonen der SG-Gleichung entsprechen im vorliegenden Fall die üblichen linearen Spinwellen. Diese Lösungen beschreiben kleine Abweichungen vom Grundzustand $\vec{s}_o = (1,0,0)$ mit konstantem s_x und weisen wie die Solitonen ein stationäres Profil auf. Das dazugehörige Spektrum kann aus der linearisierten Form der Bewegungsgleichungen II.8 bestimmt werden, wobei u dann die Bedeutung der jeweiligen Phasengeschwindigkeit zukommt. Da die

nichtlinearen Lösungen asymptotisch gegen $\vec{s}_o$ gehen, bestimmt das lineare Gleichungssystem neben den Spinwellen zusätzlich aber auch das asymptotische Verhalten der Solitonen. Umgekehrt kann man daher aber auch aus den Fundamentallösungen des linearen Problems auf die möglichen Lösungstypen der nichtlinearen Gleichungen II.8 schließen (Magyari und Thomas 1983 b). In linearisierter Form lauten die Gleichungen II.8

$$-\theta' u = \varphi'' - b\varphi \qquad \text{II.14a}$$

$$u\varphi' = \theta'' - \theta(1+b) \qquad \text{II.14b}$$

Mit dem Ansatz $\varphi = \hat{\varphi}_o e^{ikZ}$, $\theta = \hat{\theta}_o e^{ikZ}$, läßt sich ein System von Fundamentallösungen zu II.14 aus den Nullstellen des charakteristischen Polynoms

$$P(k) = k^4 + k^2(2b+1-u^2) + (1+b)b \qquad \text{II.15}$$

konstruieren. Die Lösungen haben die Gestalt

$$\varphi = \varphi_o e^{-\mathrm{Im}\,k\cdot\xi} \cos(\mathrm{Re}\,k\cdot\xi + \psi) \qquad \text{II.16a}$$

$$\theta = \theta_o e^{-\mathrm{Im}\,k\cdot\xi} \cos(\mathrm{Re}\,k\cdot\xi) \qquad \text{II.16b}$$

mit

$$k^2 = -\frac{2b+1-u^2}{2} \pm \frac{1}{2} D^{1/2} \qquad \text{II.17}$$

Dabei ist $\theta_o = |\hat{\theta}_o|$, $\varphi_o = |\hat{\varphi}_o|$, $\frac{\hat{\varphi}_o}{\hat{\theta}_o} = \frac{\varphi_o}{\theta_o} e^{i\psi}$, und die noch festgelegte Parametrisierung ξ hängt linear mit Z zusammen. Die Form der Lösung II.16 ist im wesentlichen durch das Vorzeichen der Diskriminante

$$D = (2b+1-u^2)^2 - 4b(1+b) \qquad \text{II.18}$$

festgelegt. In Fig. II.2 sind die Geschwindigkeiten u_1 und u_2,

bei denen D verschwindet, zusammen mit der kritischen Geschwindigkeit u_c in Einheiten von $C = (1+b)^{1/2}$ als Funktion von $\beta = \frac{b}{C^2}$ aufgetragen. Die Skalierung ist an dieser Stelle zweckmäßig, weil damit der gesamte Bereich von Magnetfeldern $0 \leq b \leq \infty$ auf das endliche Intervall $0 \leq \beta \leq 1$ abgebildet wird (siehe auch Kapitel II.2.3).

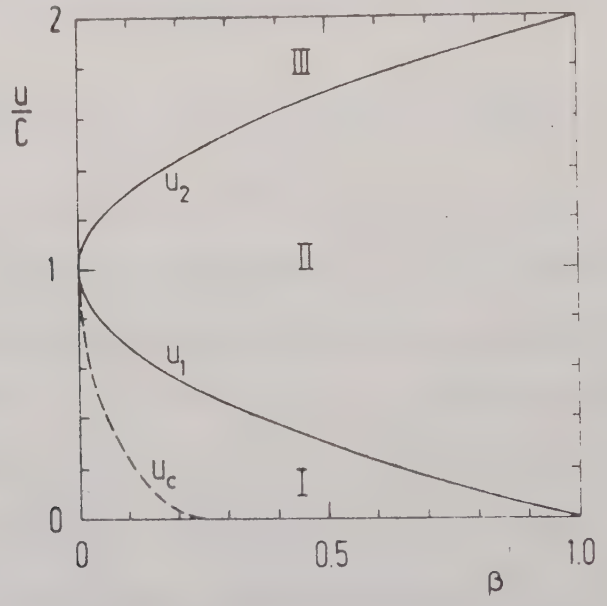


Fig. II.2 Geschwindigkeiten u_1 und u_2, bei denen die Diskriminante des charakteristischen Polynoms P(k) (Gl. II.15) verschwindet, zusammen mit der kritischen Geschwindigkeit u_c nach Magyari und Thomas (1982) in Einheiten von $C = (1+b)^{1/2}$ als Funktion von $\beta = b/C^2$.

Fig. II.2 ist zu entnehmen, daß die qualitativen Änderungen des Lösungstyps bei u_1 und u_2 nicht mit der kritischen Geschwindigkeit u_c von Magyari und Thomas zusammenhängen ($\beta_c = 1/4$). In den Bereichen I und III ist $D > 0$ und es gibt zwei reelle Lösungen für k^2. k ist daher wegen $D^{1/2} < |2b + 1 - u^2|$ für $u^2 < 2b + 1$ (Bereich I) rein imaginär, für $u^2 > 2b + 1$ (Bereich III) dagegen rein reell. Im Bereich II ist schließlich wegen $D < 0$ k^2 und damit auch k komplex.

i) Bereich I: $u < u_1$, Solitonen

Den vier imaginären Lösungen in diesem Bereich entsprechen nach

Gleichung II.16 exponentiell wachsende bzw. abfallende Lösungen. Die jeweils zwei asymptotisch beschränkten Lösungen (z.B. die positiven für $Z \to \infty$) beschreiben deshalb die Asymptotik der räumlich lokalisierten Solitonen, wobei die räumliche Ausdehnung durch

$$\delta_{sol} = \frac{1}{\mathrm{Im}\, k} \qquad \text{II.19}$$

charakterisiert ist. Für die betragsmäßig größere Lösung folgt im Limes $u \to 0$ $\theta_0 \neq 0$, $\varphi_0 = 0$. Diese Lösung gehört damit zu dem von der vorliegenden Betrachtung ausgeschlossenen Zweig von Lösungen, der im statischen Fall durch Gl. II.13b bestimmt ist. Die andere Lösung mit $\lim_{u\to 0} \frac{\theta_0}{\varphi_0} = 0$ beschreibt im statischen Fall gerade die Asymptotik des SG-Solitons. Für endliche Geschwindigkeiten folgt für diesen Lösungszweig

$$\lim_{Z\to\infty} \frac{S_z}{S_y} = \lim_{\xi\to\infty} \frac{\varphi}{\theta} = \frac{\varphi_0}{\theta_0} \qquad \text{II.20}$$

Die Geschwindigkeitsabhängigkeit von θ_0/φ_0 für $u < u_1$, sowie die der charakteristischen Länge $2\delta_{sol}$ (Gl.II.19) ist in Fig. II.3 für ein typisches Magnetfeld $b = 0.1$ ($\beta = 0.09$) zu sehen. Die deutliche Zunahme von θ_0/φ_0 mit wachsender Geschwindigkeit zeigt, daß schon aus der asymptotischen Analyse auf mit der Geschwindigkeit zunehmende Abweichungen von der SG-Beschreibung geschlossen werden kann. Für den SG-Fall folgt aus II.9

$$\lim_{Z\to\infty} S_z/S_y = u\,\gamma/\delta_{sol} << \frac{\theta_0}{\varphi_0} .$$

ii) Bereich II: $u_1 < u < u_2$, Puls-Solitonen

Die Lösung II.16 mit komplexen k beschreibt die Asymptotik von nicht-linearen Anregungen, die in der Literatur als Puls-Solitonen (nicht zu verwechseln mit den Pulsatonen, die nicht räum-

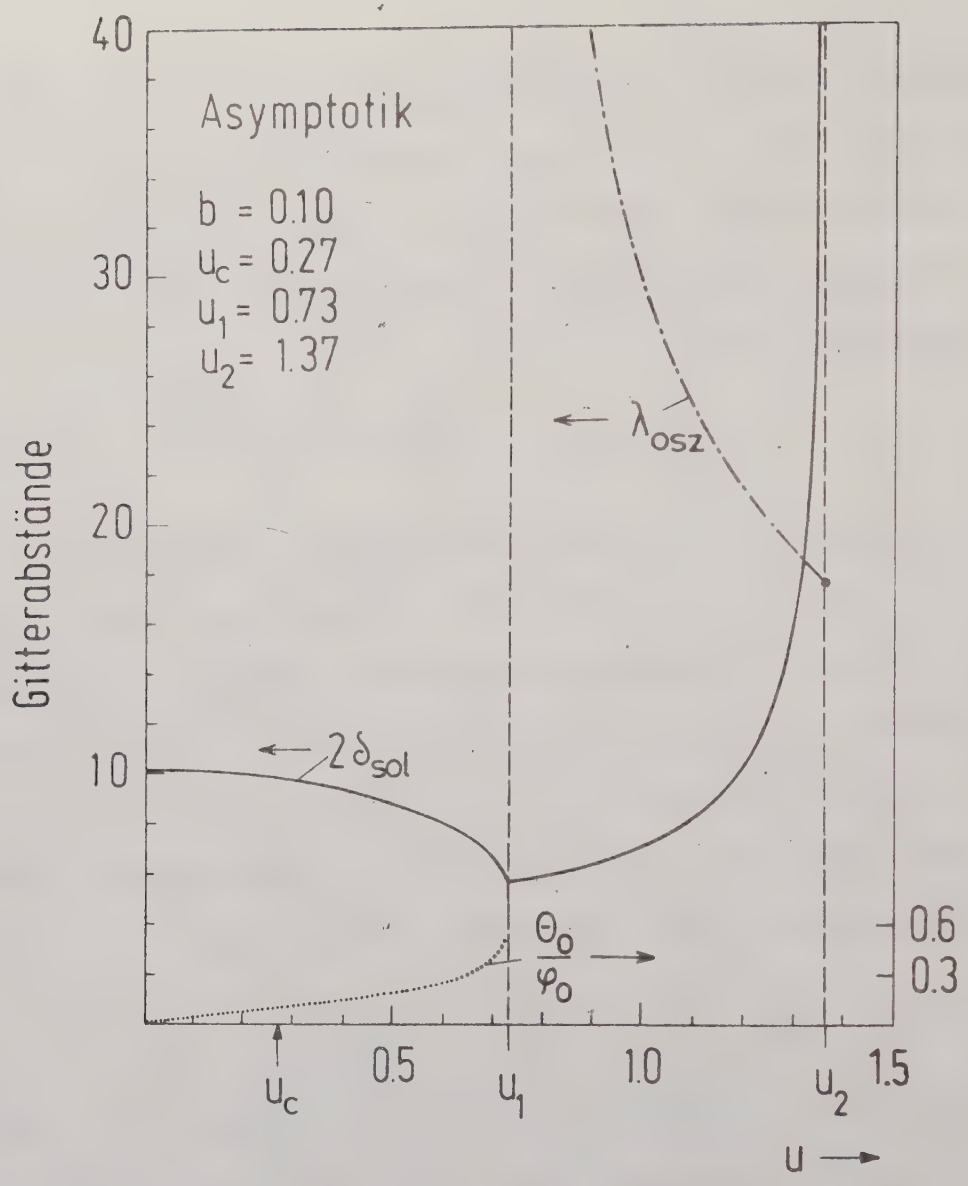


Fig. II.3 Parameter für die Lösungen der Form II.16 aus der asymptotischen Analyse für b=0.1 : $2\delta_{sol} = 2\delta_0 (\mathrm{Im}\, k)^{-1}$, $\lambda_{osz} = 2\pi\delta_0 (\mathrm{Re}\, k)^{-1}$. Die Geschwindigkeiten u_1, u_2 und u_c entsprechen Fig. II.2 (β =0.09).

lich propagieren!) bezeichnet werden. Diese Anregungen bestehen aus einer "Trägerwelle" mit Wellenlänge

$$\lambda_{osz} = \frac{2\pi}{\mathrm{Re}\, k} \qquad \text{II.21}$$

und einer die räumliche Lokalisierung beschreibenden "Einhüllenden". Die charakteristische Ausdehnung ist wieder durch $2\delta_{sol}$ (Gl.II.19) gegeben. Einhüllende und Trägerwelle bewegen sich

mit der gleichen Geschwindigkeit u. Die Geschwindigkeitsabhängigkeit der charakteristischen Größen λ_{osz} und δ_{sol} ist wiederum in Fig. II.3 gezeigt. Die Wellenlänge divergiert bei der minimalen Geschwindigkeit des Bereiches u_1. Die monotone Abnahme dieser Wellenlänge bedeutet eine allmähliche Ausbildung oszillatorischer Ausläufer des Puls-Solitons mit zunehmender Geschwindigkeit. Gleichzeitig nimmt die Breite der Einhüllenden und damit der Magnonencharakter der Lösung zu, bis sich schließlich die Lösung bei der maximalen Geschwindigkeit des Bereiches u_2 auf ein einzelnes, wohldefiniertes Magnon reduziert. Letzteres kommt dadurch zum Ausdruck, daß δ_{sol} in diesem Grenzfall divergiert.

iii) Bereich III: $u > u_2$, Magnon

Den reellen Lösungen dieses Geschwindigkeitsbereiches entspricht das übliche Magnonenspektrum

$$\omega^2 = (k^2 + b)(1 + b + k^2) \qquad \text{II.22}$$

Aus II.22 folgt, daß die minimale Phasengeschwindigkeit für die Magnonen durch

$$\text{Min}\left(\frac{\omega}{k}\right) = u_2 \qquad \text{II.23}$$

gegeben ist und damit gerade die Grenzgeschwindigkeit für die Puls-Solitonen (Bereich II) darstellt. Umgekehrt ist die Bedingung II.23 aber auch ein notwendiges Stabilitätskriterium für die stationäre Bewegung von Solitonen bzw. Puls-Solitonen, da damit eine dem Čerenkov-Effekt entsprechende Emission von Magnonen bei der Propagation der nichtlinearen Anregungen nicht auftreten kann (vgl. Kapitel III 3.4 ii). Als Folge der Anisotropie ist $\theta_o < \varphi_o$, d.h. die Auslenkung in Richtung der Anisotropie ist

kleiner als senkrecht dazu.

II 2.3 Übergang vom SG-Modell zum isotropen Heisenberg-Modell

Im SG-Modell reduziert sich die Dispersion II.22 auf

$$\omega^2 = b + k^2 \qquad \text{II.24}$$

und neben u_2 ist in diesem Falle auch u_1 gleich der minimalen Phasengeschwindigkeit ($u_1 = u_2 = 1$). Es gibt im SG-Modell nur die durch die Beschränkung auf eine Bewegung in der Ebene leichter Magnetisierung gekennzeichneten planaren Solitonen. Wie schon die Analyse von Magyari und Thomas (1982) zeigt, ist damit die SG Beschreibung strenggenommen nur im Limes $b \to 0$ ($\beta \to 0$ in Fig. II.2) gerechtfertigt, wenn also die Anisotropie sehr groß gegen das Magnetfeld ist.

Im entgegengesetzten Grenzfall $b \gg 1$ ist die Anisotropie gegen das Magnetfeld vernachlässigbar. $\beta=1$ in Fig. II.2 entspricht damit dem isotropen Heisenberg Modell. Die entsprechenden nichtlinearen Anregungen, für die es analytische Ausdrücke gibt (Nakamura und Sasada 1974), sind in Einklang mit der asymptotischen Analyse nur vom Typ der Puls-Solitonen ($\lim_{\beta \to 1} u_1 = 0$; Fig. II.2). Als Folge der fehlenden Galilei-Invarianz der Bewegungsgleichung hängen Form und Amplitude der Puls-Solitonen explizit von der Geschwindigkeit ab. Ganz im Gegensatz zu solitären Wellen von Korteweg-de Vries- und SG-Gleichung werden die Puls-Solitonen dabei mit wachsender Geschwindigkeit breiter. Die Breite divergiert und die Amplitude verschwindet bei der Grenzgeschwindigkeit u_2, bei der das Puls-Soliton in das Magnon niedrigster Pha-

sengeschwindigkeit übergeht.

Wie das SG Modell, so ist auch das isotrope Heisenberg Modell (einen Überblick über die Eigenschaften findet man z.B. bei Fogedby 1980a) vollständig integrabel (Takhtajan 1977) und der Hamiltonian separiert in Beiträge von Magnonen und Puls-Solitonen. Interessant ist diese Eigenschaft hier im Hinblick darauf, daß die Analyse der Phasenverschiebungen bei der Magnon-Puls-Soliton-Streuung analytisch durchgeführt werden kann (Fogedby 1980b). Damit ist die Verteilung der Freiheitsgrade auf die einzelnen Anregungen explizit möglich (vgl. Kapitel I 2.2). Das Magnon minimaler Phasengeschwindigkeit bildet die Trägerwelle des Puls-Solitons und wird als Folge der räumlichen Lokalisierung der nichtlinearen Anregung vom Magnonen-Kontinuum abgespalten. Aus dieser Abspaltung folgt das bereits in Kapitel II 2.2 erwähnte Stabilitätskriterium im Sinne des Čerenkov-Effektes. Auf der anderen Seite bedeutet das aber für ein Puls-Soliton, daß es kontinuierlich in den Grundzustand deformiert werden kann und keine erhaltene topologische Ladung aufweist. Die Deformation in den Grundzustand ist kein Widerspruch zur Lücke im Anregungsspektrum, da klassisch die Energie von der Amplitude abhängt und beim Übergang in das Magnon minimaler Phasengeschwindigkeit die Amplitude des Puls-Solitons verschwindet.

Im Hinblick auf die numerische Simulation (Kapitel II 4) ist zu ergänzen, daß Tjon und Wright (1977) unabhängig von dem expliziten Nachweis der Integrabilität des isotropen Heisenberg Modells (Takhtajan 1977), die Stabilität einzelner Puls-Solitonen numerisch untersucht haben. Dabei wurde die zeitliche Entwicklung von Störungen der exakten Lösungen untersucht.Zwar ist eine Untersuchung solcher Störungen nicht systematisch möglich; aus der Ent-

wicklung willkürlicher Startkonfigurationen ergeben sich jedoch starke Hinweise auf die Stabilität, wie sie aus dem zu II.5 entsprechenden Funktional nicht gewonnen werden können.

Der planare Ferromagnet endlicher Energie liegt also im Übergangsbereich zwischen SG und isotropem Heisenberg Modell, die beide strikte Solitonen aufweisen. Aus der asymptotischen Analyse ist zu entnehmen, daß bei endlicher Anisotropie nebeneinander, wenngleich mit verschiedener Geschwindigkeit, Anregungen möglich sind, deren Eigenschaften denen der beiden Grenzfälle entsprechen. Die Puls-Solitonen des isotropen Heisenberg Modells sind jedoch weder topologisch stabil, noch bei Geschwindigkeitsänderung forminvariant, wie es bei einer Behandlung im Rahmen der SG Theorie vorausgesetzt ist. Die durch die mechanische Pendelkette charakterisierte, topologische Struktur reicht deshalb nicht zur Beschreibung des planaren Ferromagneten aus.

Die bisher vorliegenden Ergebnisse zum isotropen Heisenberg Modell mit uniaxialer Anisotropie (Akhiezer und Borovik 1967, 1975) können hier nicht verwendet werden, da die Anisotropieachse in diesen Fällen parallel zum Magnetfeld gewählt ist. Daß es im planaren Ferromagneten eine statische Lösung gibt, die unabhängig von der Anisotropie ist, weist darauf hin, daß die von Tjon und Wright (1977) gefundene Lücke im Puls-Solitonenspektrum bei kleinen Geschwindigkeiten hier nicht auftritt. Ein zusätzliches Magnetfeld in Anisotropierichtung zur Überprüfung des Charakters der Solitonen haben Hackenbracht und Schuster (1983a) für das planare Modell vorgeschlagen. Dieser Fall, bei dem die Symmetrie bezüglich der Propagationsrichtungen der Solitonen gebrochen wird, spielt jedoch im weiteren keine Rolle.

II 3 Variationsrechnung

II 3.1 Eigenschaften des Ansatzes

Ein Soliton ist charakterisiert durch die Trajektorie auf der Einheitskugel, die ein herausgegriffener Spin durchläuft, wenn sich das Soliton vorbeibewegt, sowie die Verteilung der Spins entlang dieser Trajektorie zu einem festen Zeitpunkt. Für räumlich lokalisierte, nichtlineare Anregungen muß die Trajektorie am Punkt $\vec{s}_o = (1, 0, 0)$ beginnen und enden (vgl. Kapitel II 2.2). Die Trajektorie eines planaren Solitons im SG Limes ist ein Kreis in der x-y-Ebene, wobei der Schwerpunkt des Solitons durch den am weitesten von $\vec{s}_o$ entfernten Punkt $\vec{s}_m = (-\cos\theta_m, 0, \sin\theta_m)$ mit $\theta_m = 0$ gegeben ist. Auch für die von der x-y-Ebene abweichenden Trajektorien zu endlicher Geschwindigkeit ist der Schwerpunkt am weitesten von $\vec{s}_o$ entfernt und läßt sich aus Symmetriegründen allein durch $\theta_m \neq 0$ charakterisieren. Als Ausgangspunkt für die Variationsrechnung wird ein Zwei-Parameter-Ansatz in der Form

$$s_x(Z) = 1 - c^2 \, (1 - \cos \phi(Z)) \qquad \text{II.25a}$$

$$s_y(Z) = c \, \sin \phi(Z) \qquad \text{II.25b}$$

$$s_z(Z) = - c \, s \, (1 - \cos \phi(Z)) \qquad \text{II.25c}$$

$$\phi(Z) = 4 \tan^{-1} \exp (Z / \delta) \qquad \text{II.25d}$$

mit $c = \cos(\frac{\theta_m}{2})$ und $s = \sin(\frac{\theta_m}{2})$ gewählt, der es gestattet, das Funktional $K\{\vec{s}\}$ (Gl. II.5) analytisch auszuwerten. Der Ansatz beschreibt eine kreisförmige Trajektorie durch die Punkte $\vec{s}_o$ und $\vec{s}_m$ in einer um den Winkel θ_m gegen die x-y-Ebene geneigten Ebene.

ϕ beschreibt die Abweichung der Spins von $\vec{s}_o$ in dieser geneigten Ebene und damit deren Verteilung entlang der Trajektorie. Analog dem SG Fall ist δ dabei ein Maß für die Solitonenbreite. Durch die Änderung des Durchlaufsinns der Trajektorie, $\phi \rightarrow -\phi$, ergibt sich das entsprechende Antisoliton. Die Gleichungen II.25 reproduzieren mit $\theta_m = 0$ gerade das statische, planare SG-Soliton und erlauben die Beschreibung von Abweichungen vom planaren Verhalten für endliche Geschwindigkeiten. Wesentlich an dem Ansatz ist, daß man damit den vollständigen topologischen Zerfall eines planaren Solitons beschreiben kann. Mit zunehmendem θ_m von 0 bis π ändert sich der Charakter des Soitonenprofils kontinuierlich vom planaren Grenzfall zum Grenzfall nichtlinearer Wellenpakete kleiner Amplitude. Dieser Übergang läßt sich durch das "Schließen eines Schirms" veranschaulichen, bei dem eine Speiche (Spins $\vec{s}_o$) festgehalten wird (siehe Figur II.4).

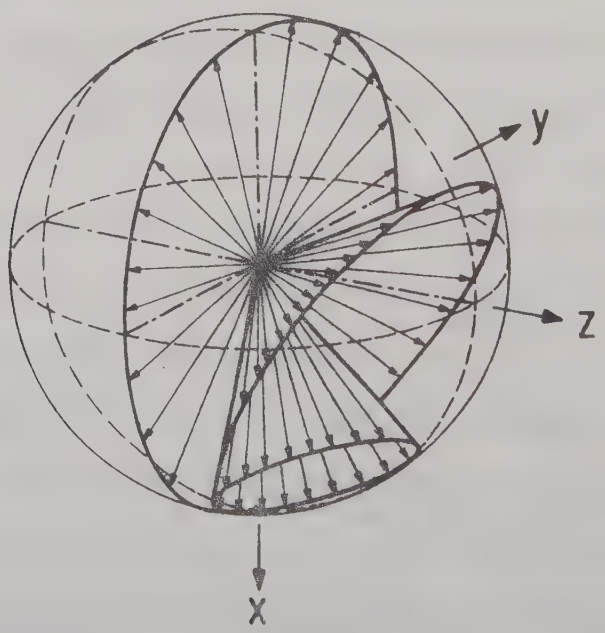


Fig. II.4 Kreisförmige Trajektorie des Variationsansatzes (Gl. II.25) mit $\Theta_m = 0,\ 0.34\,\pi,\ 0.75\,\pi$, die das "Schließen des Schirms" veranschaulichen.

Die Annahme einer kreisförmigen Trajektorie für beliebige θ_m ist dabei sicher ebenso eine Näherung wie die aus den Gleichungen II.25 resultierende Asymptotik

$$\lim_{Z\to\infty} \frac{s_z}{s_y} = 0 \quad , \qquad \text{II.26}$$

die von den exakten Resultaten in Kapitel II.2.2 abweicht. Der Einfluß dieser Näherungen wird zusammen mit den Ergebnissen der numerischen Simulation in Kapitel II 4 diskutiert. Die Variationsansätze für $\theta(Z)$ und $\varphi(Z)$, wie sie von Magyari und Thomas (1982), sowie Kumar (1982) verwendet wurden, sind zur Beschreibung der kontinuierlichen Faltung über die polare Achse nicht geeignet. Wie Figur II.5 zu entnehmen ist, führen diese Ansätze für $\theta_m = \frac{\Pi}{2}$ im Gegensatz zu dem Ansatz II.25 zu unphysikalischen Spitzen in den Trajektorien. Diese Ansätze sind deshalb nur für $\theta_m < \frac{\Pi}{2}$ verwendbar.

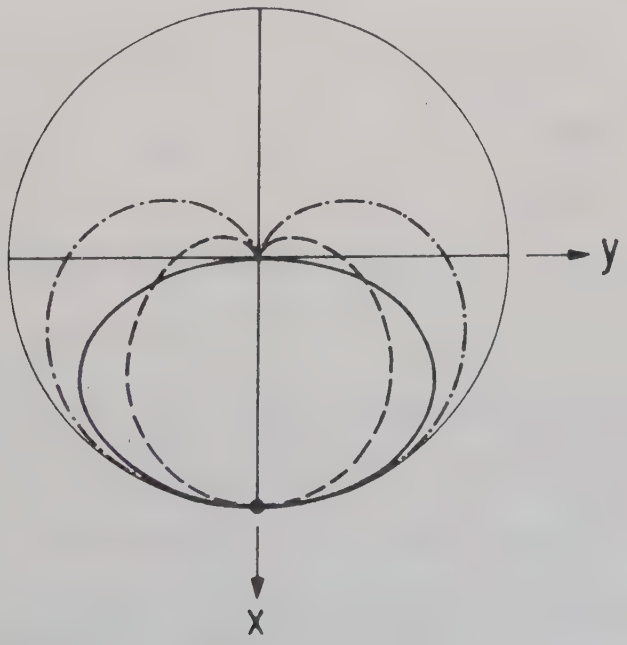


Fig. II.5 Projektion der Trajektorie des Variationsansatzes (Gl. II.25) mit $\Theta_m = \Pi/2$ in die x-y-Ebene (——). Man beachte die unphysikalischen Spitzen in den entsprechenden Kurven von Kumar (1982) (-·-·-) sowie Magyari und Thomas (1982) (-------).

Darüberhinaus ist eine Parametrisierung in sphärischen Polarkoordinaten generell ungeeignet, den in Fig. II.4 veranschaulichten, kontinuierlichen Übergang zu beschreiben. Fig. II.6 zeigt, daß diese Parametrisierung bei $\theta_m = \frac{\Pi}{2}$ unstetig ist, was damit zusammenhängt, daß dem Grundzustand für $\theta_m < \frac{\Pi}{2}$ bezüglich des Azimutwinkels φ unterscheidbare, entartete Vakuua zugeordnet sind. Diese dem topologischen Erhaltungssatz des SG-Modells angemessene Unterscheidung ist jedoch im 3D-Spinraum ohne Bedeutung.

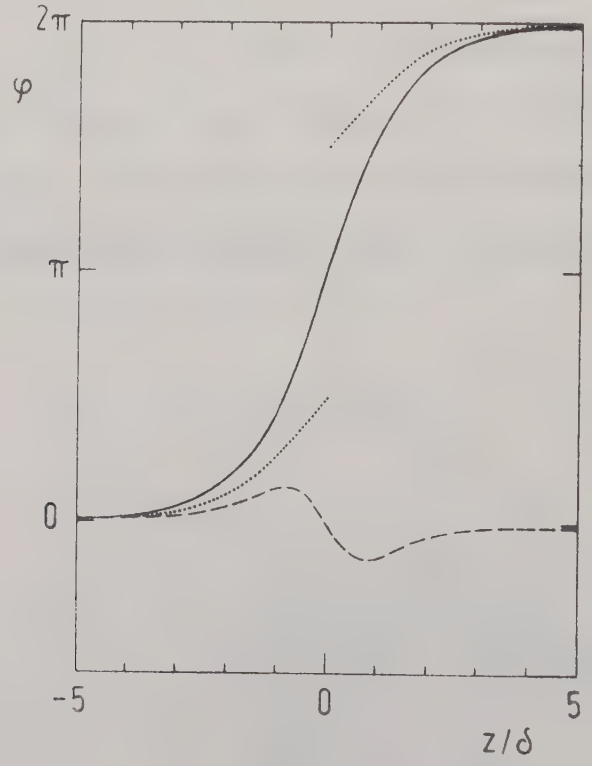


Fig. II.6 Azimutwinkel φ der sphärischen Polarkoordinaten für die Trajektorie des Variationsansatzes (Gl.II.25) mit $\Theta_m = 0$ (———), $\pi/2$ (·····) sowie $\Theta_m > \pi/2$ (-------).

Die aus $\varphi(Z)$ zu entnehmende scheinbare Abnahme der Soitonenbreite mit wachsendem θ_m (vgl. Figur II.6), ist darüberhinaus nur ein geometrischer Effekt, der allein aus der Änderung der Projektion der Trajektorie in die x-y-Ebene resultiert. Deshalb läßt sich

ein Soliton gemäß Gleichung II.25 immer noch im Rahmen der Kontinuumstheorie beschreiben. φ ist lediglich für beliebige θ_m kein geeignetes Maß mehr für den Winkel zwischen benachbarten Spins. Aus den genannten Gründen werden auch numerische Simulationen, die sphärische Polarkoordinaten verwenden (Wysin et al 1982), problematisch wenn θ_m gegen $\frac{\Pi}{2}$ geht. Dieser Punkt ist noch in Zusammenhang mit den vorliegenden numerischen Simulationen (Kapitel II 4) von Bedeutung

II 3.2 Das erweiterte Solitonenband im Rahmen des Variationssatzes

Einsetzen von Gleichung II.25 in die Gleichungen II.3 und II.6 liefert nach einigen Integrationen die einfachen Ausdrücke

$$E(\theta_m,\delta) = 4\,c^2\,\{\frac{1}{\delta} + \delta\,(b+\frac{2}{3}s^2)\} \qquad \text{II.27}$$

und

$$F(\theta_m) = 2\,\Pi\,(s-1) \qquad \text{II.28}$$

wobei im ursprünglichen Funktional F, Gleichung II.6, s_z durch (s_z-1) ersetzt wurde, um eine unphysikalische Stufenfunktion abzuspalten.

Variation von K, Gleichung II.5, nach δ ergibt

$$\delta = (b+\frac{2}{3}s^2)^{1/2} \qquad \text{II.29}$$

Damit folgt aus II.27

$$E(\theta_m) = E_o\,c^2\,(1+2\,s^2/3\,b) \qquad \text{II.30}$$

wobei $E_o = 8b^{1/2}$ die Ruheenergie des statischen SG-Solitons in den hier verwendeten Einheiten ist. Die Variation bezüglich θ_m führt schließlich auf

$$0 = \frac{dE(\theta_m)}{d\theta_m} - u\frac{dF(\theta_m)}{d\theta_m} \qquad \text{II.31}$$

Als Folge der Bedingung II.29 hängt II.31 nicht mehr explizit von δ ab und es ist daher auch möglich, statt θ_m die Geschwindigkeit u gemäß

$$u(\theta_m) = -\frac{dE(\theta_m)}{d\theta_m} \Big/ \frac{dF(\theta_m)}{d\theta_m} \qquad \text{II.32}$$

als unabhängige Variable aufzufassen. Figur II.7 zeigt Solitonenenergie in Einheiten von E_o für verschiedene Magnetfelder als Funktion des Winkels θ_m. Für das statische SG-Soliton findet man die "energetische Instabilität" (Magyari und Thomas 1982)

$$\frac{d^2E(\theta_m)}{d\theta_m^2} \propto (b_c - b) \qquad \text{II.33}$$

mit dem exakten Wert für das kritische Feld $b_c = \frac{1}{3}$ wieder. Für $b < b_c$ gibt es zusätzlich ein Maximum der Energie für einen Winkel $\theta_m^* \neq 0$. Wegen $\frac{dF}{d\theta_m} \neq 0$ für $0 \leq \theta_m \leq \frac{\pi}{2}$ folgt für diese Lösung aus Gleichung II.31 u = 0. Das kritische Magnetfeld ist, wie bei Magyari und Thomas 1982, 1983a, gerade durch die "Invertierte Bifurkation" der beiden statischen Lösungszweige gekennzeichnet. Gegen die Annahme dieser Autoren , daß die zweite statische Lösung instabil sei, sprechen die Ergebnisse von Wysin et al (1982), die ebenfalls eine weitere statische Lösung neben der SG-Lösung diskutieren. In Gegensatz zu den entsprechenden numerischen Resultaten von Wysin et al hat jedoch die Steigung von E(u) für diese Konfiguration zu verschwinden, was in Fig. II.8 zum Ausdruck kommt. Diese Abbildung zeigt die Energie der Solitonen als Funktion der

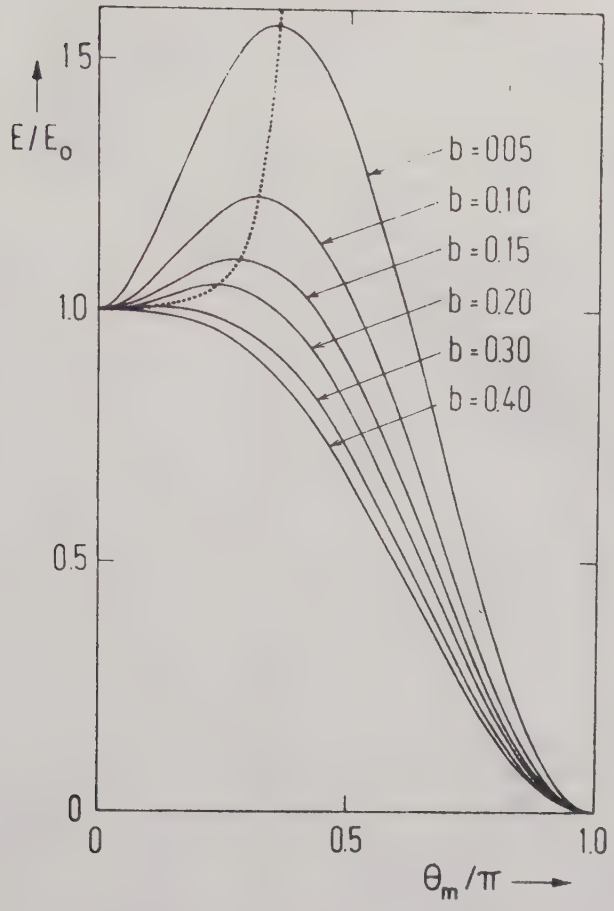


Fig. II.7 Variationsenergie als Funktion von Θ_m für verschiedene Magnetfelder b. Das Maximum der Energie $E(\Theta_m^*)$ bewegt sich für $b \to b_c = 1/3$ die gepunktete Kurve herunter.

Geschwindigkeit wiederum für verschiedene Magnetfelder. $E/E_o = 1$, $u = 0$ entspricht jeweils dem statischen SG-Soliton. Der Übersichtlichkeit halber sind die Werte, die aus der Symmetrie der Energie gegen Vertauschung des Vorzeichens der Geschwindigkeit ($\theta_m \to -\theta_m$) folgen, weggelassen. Wie in Kapitel II.1.2 erwähnt wurde, gibt es eine kritische Geschwindigkeit $u_c(b)$, die dadurch gekennzeichnet ist, daß für die entsprechende Lösung infinitesimale Formänderungen nicht mit einer Änderung der Geschwindigkeit verknüpft sind (d.h. $\frac{du}{d\theta_m} = 0$). In Figur II.8 kommt diese Eigenschaft durch eine vertikale Tangente zum Ausdruck. Die aus dem Variationsansatz resultierende kritische Geschwindigkeit als Funkion des Magnetfel-

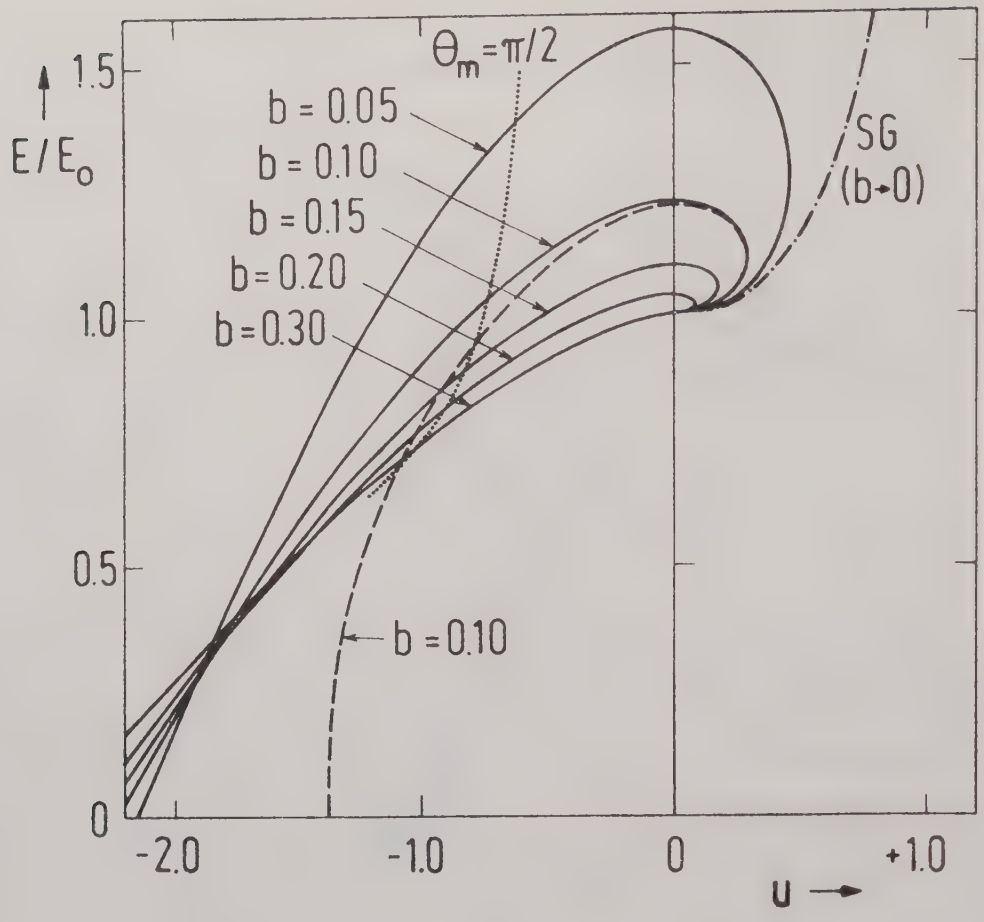


Fig. II.8 Variationsergebnis für das kontinuierliche Solitonenband (———), das sich von E = E_o, u = 0 bis E = 0 herab erstreckt, für verschiedene Magnetfelder als Funktion der Solitonengeschwindigkeit. Dazu ist das SG - Band (—·—·—·) und das aus der numerischen Simulation für b = 0.1 resultierende Band (– – – –) gezeigt. $\Theta_m = \pi/2$ ist erreicht, wo die Kurven die gepunktete Linie schneiden.

des ist in Fig. II.9 mit dem exakten Resultat von Magyari und Thomas (1982) verglichen. Wie bereits erwähnt, wird der exakte Wert $b_c = \frac{1}{3}$ ($u_c(b_c) \equiv 0$) im Rahmen des Variationsansatzes reproduziert. Darüberhinaus sind die Abweichungen vom exakten Ergebnis im gesamten Bereich $0 < b < b_c$ gering. Im Grenzfall $b \to b_c$ folgt zusätzlich die richtige Asymptotik

$$u_c \propto (b_c - b)^{3/2} \qquad \text{II.34}$$

Neben den Lösungen des Variationsansatzes sind in Fig. II.8 auch die

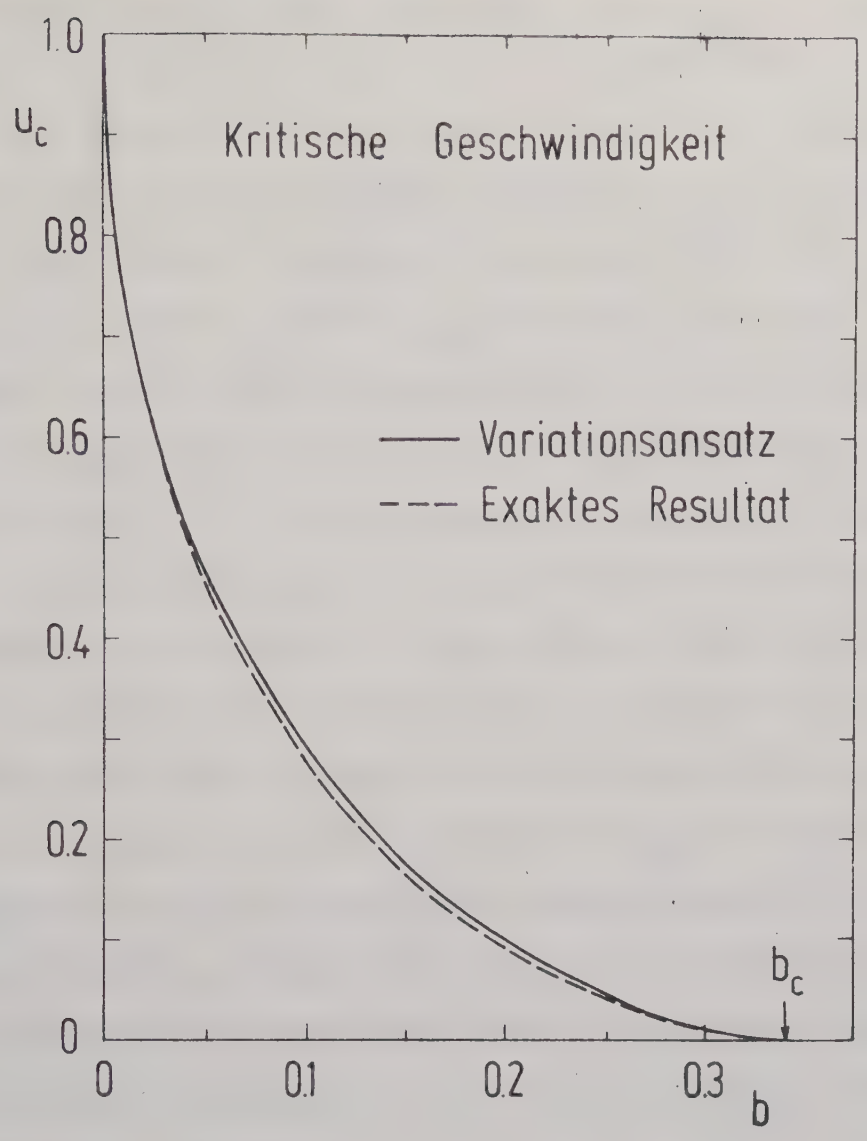


Fig. II.9 Kritische Geschwindigkeit u_c aus der Variationsrechnung (———) in Vergleich zum exakten Resultat von Magyari und Thomas (1982) (------) als Funktion des Magnetfeldes b (b_c = 1/3).

entsprechenden Lösungen aus der SG Theorie zu entnehmen. Gegenüber diesen rein planaren Lösungen zeigt das Ergebnis der Variationsrechnungen ein erweitertes Band von Solitonenlösungen mit einem kontinuierlichen Übergang von der statischen SG-Lösung ($E = E_o$, $u = 0$ für $\theta_m = 0$) zu Anregungen nahe dem Grundzustand mit einer endlichen Grenzgeschwindigkeit u_m ($E \to 0$, $u \to u_m$ für $\theta_m \to \pi$). Nur im Limes $b \to 0$, wenn der in Figur II.4 gezeigte Übergang verboten ist, gilt für die planaren Solitonen der implizit in der SG-Theorie enthaltene topologische Erhaltungssatz. In Figur

II.2 ist zu sehen, daß u_m immer größer als die minimale Phasengeschwindigkeit u_2 der Magnonen ist (z.B. b = 0.05, u_2= 1.25). Das deutet darauf hin, daß der Variationsansatz auf Grund der Näherungen hinsichtlich von Form und Asymptotik der Solitonen (vgl. Kapitel II 3.1) die Energie der Anregungen kleiner Amplitude überschätzt. Die Energie der Lösungen mit $\theta_m \gtrsim \theta_m^*$ liegt jedoch deutlich unterhalb der der Anregungen bei Wysin et al (1982). Außerdem gibt es nach dem Ansatz in Einklang mit der asymptotischen Analyse auch nichtlineare Anregungen für $\theta_m > \frac{\Pi}{2}$ (vgl. Figur II.8), also jenseits des von Wysin et al angegebenen Existenzbereiches. Schließlich zeigt Figur II.7, daß die Solitonenenergie zwischen $\theta_m = 0$ und $\theta_m = \Pi$ kein zusätzliches Minimum aufweist. Ein solches Minimum, wie es von Kumar (1982) diskutiert wurde, ist somit nicht von physikalischer Relevanz, sondern vielmehr ein Artifakt des entsprechenden Variationsansatzes, der keine kontinuierliche Deformation der Lösungen zum Grundzustand erlaubt. Schon Magyari und Thomas (1982) haben darauf hingewiesen, daß auch ihr Ansatz ein zusätzliches künstliches Minimum ergibt.

II 4 Numerische Simulation

Um die Voraussagen des Variationsansatzes und speziell die Stabilität der Lösungen im Bereich $\theta_m^* < \theta_m < \Pi$ zu überprüfen, wurden numerische Simulationen der Solitondynamik im gesamten Bereich $0 < \theta_m < \Pi$ durchgeführt. Schon die Ergebnisse von Wysin et al (1982) ergeben Hinweise darauf, daß auch jenseits der kritischen Geschwindigkeit von Magyari und Thomas (1982) stabile nichtlineare Anregungen existieren. Zudem ist es nach der Analyse von Tjon

und Wright (1977, vgl. Kapitel II 2.3) auch möglich, daß stabile Puls-Solitonen zumindest im isotropen Heisenberg-Modell ohne topologischen Erhaltungssatz vorliegen können. Die numerischen Rechnungen wurden auf einer Kette von 200 Spins mit periodischen Randbedingungen durchgeführt. Da sich die Solitonenlösungen asymptotisch den Vakua exponentiell annähern, und die bei den durchgeführten Simulationen beobachtete Ausdehnung der Solitonen immer klein gegen die verwendete Kettenlänge ist, kann ein Einfluß der endlichen Länge des Systems auf die Ergebnisse ausgeschlossen werden. Als Startkonfiguration wurde die diskretisierte Version des Variationsansatzes II.25 verwendet. Damit ist die Gesamtenergie, die nur von den beiden Variationsparametern θ_m und δ abhängt, definiert und bleibt während der Zeitentwicklung gemäß der Bewegungsgleichung II.2 erhalten. Außer für die größten Werte von θ_m (siehe unten) ist eine Relaxation der Anfangskonfiguration zu einem numerisch stabilen Soliton-Profil zu beobachten. Diese Relaxation ist mit der Anregung zusätzlicher Oszillationen verbunden. Die Amplitude dieser Oszillationen liefert augenscheinlich ein direktes Maß für die Güte der Anfangskonfiguration. Mit wachsendem θ_m nehmen die Oszillationen zu, was mit den dem Ansatz inhärenten Näherungen zusammenhängt. Allein die Tatsache, daß Relaxation zu einem wohldefinierten Profil auftritt, selbst für $\theta_m > \frac{\pi}{2}$, ist das stärkste Argument für die dynamische Stabilität einzelner, propagierender Solitonen. Um diese Relaxation zu erhalten, ist es wesentlich, speziell für $\theta_m > \theta_m^*$, daß der Variationsansatz bereits die grundlegenden Eigenschaften der endgültigen Lösungen enthält.

II 4.1 Das erweiterte Solitonband

Die numerisch bestimmte Kurve E(u) ist für ein spezielles, im experimentell zugänglichen Bereich liegenden Magnetfeld b = 0.1 in Figur II.8 gezeigt. Für die dazugehörigen Lösungen kann man 4 Bereiche unterscheiden, die im folgenden am Beispiel signifikanter Konfigurationen charakterisiert werden.

i) $0 \leq \theta \leq \theta_m^* = 0.32\ \Pi$

In diesem Bereich sind die durch die Startkonfiguration bedingten Oszillationen gering und der Ansatz liefert eine gute Beschreibung für die Solitonendynamik. Ausgehend vom statischen Grenzfall ist für $u<u_c$ die numerisch bestimmte Solitonengeschwindigkeit nur ungefähr 10% geringer als die Geschwindigkeit aus der Variationsrechnung. Das bedeutet andererseits jedoch, daß die Abweichungen von der Geschwindigkeit aus der SG-Theorie, wie bereits von Wysin et al (1982) gezeigt wurde, deutlich sind. Die Form der Solitonen, speziell für kleine Geschwindigkeiten, weicht allerdings nicht so drastisch von der der planaren Solitonen ab, daß dies zu signifikanten Modifikationen der entsprechenden Formfaktoren führen würde (Anhang). Wie auch schon aus dem Ergebnis des Variationsansatzes zu schließen ist, überschätzen Wysin et al (1982) die Solitonenenergie für $\theta_m \rightarrow \theta_m^*$ deutlich. Das hängt damit zusammen, daß das SG-Soliton, von dem diese Autoren ausgehen, eine zunehmend schlechtere Startkonfiguration für die endgültige Lösung darstellt. Der Energieanteil der daraus resultierenden, starken Oszillation ist jedoch nicht von der Solitonenenergie getrennt, was auch die endliche Steigung von E(u) bei der zweiten statischen Lösung erklärt. Im Gegensatz dazu ist das Ergebnis der vom Variationsansatz ausgehenden Simulation in guter Übereinstimmung

mit der Forderung nach einer horizontalen Tangente für diese durch θ_m^* charakterisierte Lösung (Figur II.8). Für $\theta_m < \theta_m^*$ ist $u < u_2$. Damit ist die Abweichung der Asymptotik II.26 von dem aus Figur II.3 zu entnehmenden exakten Wert wegen $\frac{\Theta_o}{\varphi_o} << 1$ gering. Die in Figur II.10 gezeigten Projektionen in die x-z-Ebene verdeutlichen überdies, daß die endgültigen Trajektorien für $\theta_m < \theta_m^*$ mit der Kreisform des Ansatzes II.25 , die in dieser Projektion Geraden entspricht, gut übereinstimmen. Beides erklärt die nur geringen Oszillationen bei der Relaxation und damit die unwesentliche Überschätzung der Solitonenenergie durch den Variationsansatz in diesem Bereich.

ii) $\theta_m > \theta_m^*$, $|u| < u_1 = 0.733$

Für θ_m oberhalb des Wertes für die zweite statische Lösung θ_m^* zeigt die Biegung der Projektion der Trajektorie in die x-z-Ebene (Figur II.10) zunehmende Abweichungen von der kreisförmigen Variationstrajektorie an. Um zu vermeiden, daß die aus diesem Grund verstärkt auftretenden Oszillationen einen wesentlichen Anteil an der Gesamtenergie enthalten, muß deshalb die Startkonfiguration verbessert werden. Dies kann durch die Berücksichtigung der exakten Asymptotik erfolgen. Als Beispiel ist die durch vernachlässigbare Oszillationen gekennzeichnete endgültige Trajektorie für $\theta_m = 0.47\Pi$ in Fig. II.11 in einer Projektion in die y-z-Ebene gezeigt. In dieser Projektion entspricht dem asymptotischen exponentiellen Abfall die eingezeichnete Gerade, die von der Lösung gut reproduziert wird und deren Steigung über Gleichung II.20 aus Figur II.3 entnommen werden kann. Die Energie der endgültigen Lösung ist um 7% niedriger als die der Startkonfiguration aus dem Variationsansatz. Daß lediglich die Energie der Magnonen subtrahiert ist, kann daraus geschlossen werden,

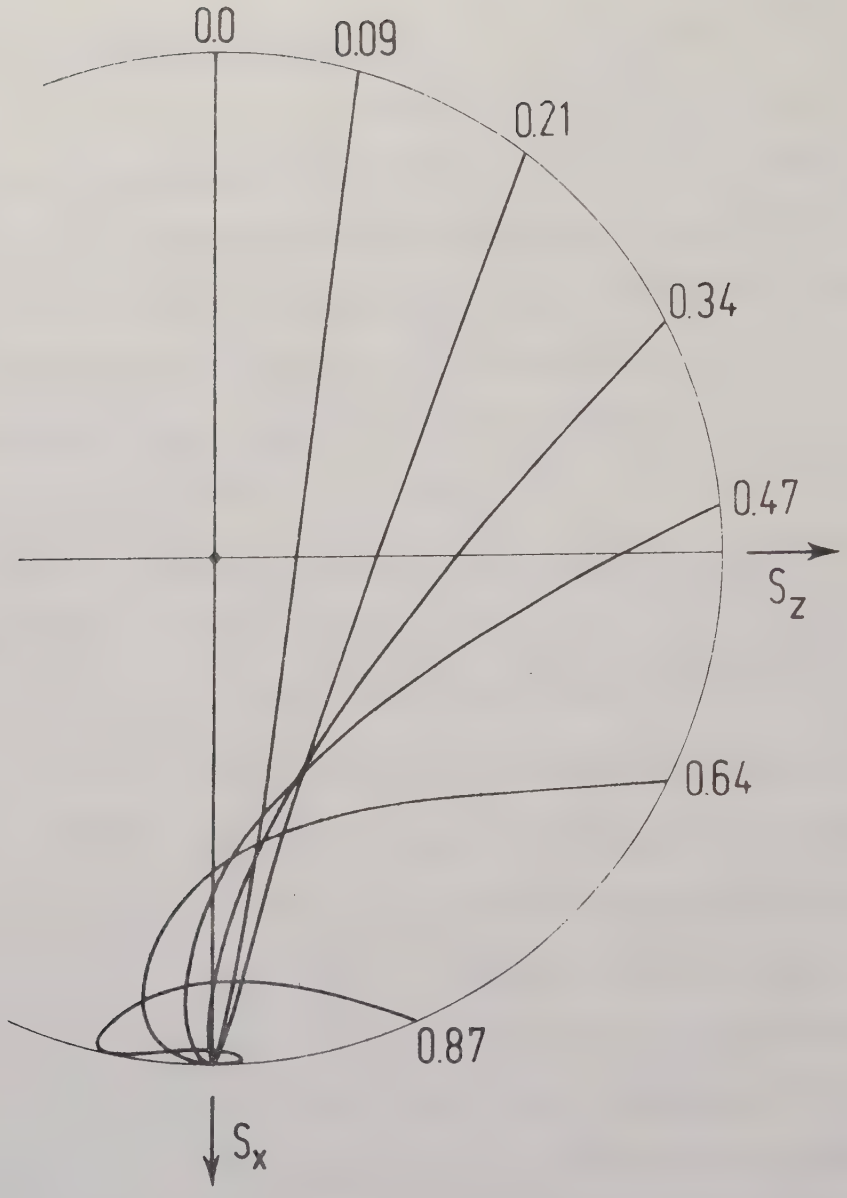


Fig. II.10 Projektion der nach der Relaxation stationären, numerisch simulierten Solitonentrajektorien in die x-z-Ebene für b = 0.1 und verschiedene Werte Θ_m/π, die jeweils am Rand des Kreises angegeben sind. Dem Variationsansatz (Gl. II.25) entsprechen in dieser Projektion Geraden. Man beachte die räumlichen Oszillationen für Θ_m/π = 0.87.

daß sich Spinkonfiguration im Bereich des Schwerpunktes und die Solitonengeschwindigkeit nur geringfügig ändern, die starken Oszillationen aber verschwinden. Auf der anderen Seite bedeutet diese Tatsache aber auch, daß der Variationsansatz, abgesehen von der Asymptotik, immer noch die wesentlichen Züge der exakten Lösung zeigt und damit eine gute erste Startkonfiguration abgibt.

Dies ist wichtig, denn die Simulation liefert wie die Variationsrechnung symmetrische, nicht-oszillierende Solitonenlösungen, die sich auch kontinuierlich ändern, wenn $\theta_m \frac{\Pi}{2}$ überschreitet. Die von Wysin et al (1982) ausführlich diskutierten oszillatorischen Lösungen im Bereich $\theta_m^* < \theta_m < \frac{\Pi}{2}$ scheinen deshalb auf unzureichende Startbedingungen dieser Autoren zurückzuführen sein. Das im Gegensatz zu den vorliegenden Ergebnissen auftretende "Schockwellen" Phänomen für $\theta_m \to \frac{\Pi}{2}$ ist darüberhinaus wohl mit der in Kapitel II.3.1 erwähnten Diskontinuität der Parametrisierung in sphärischen Koordinaten bei $\frac{\Pi}{2}$ (siehe Figur II.6) erklärbar.

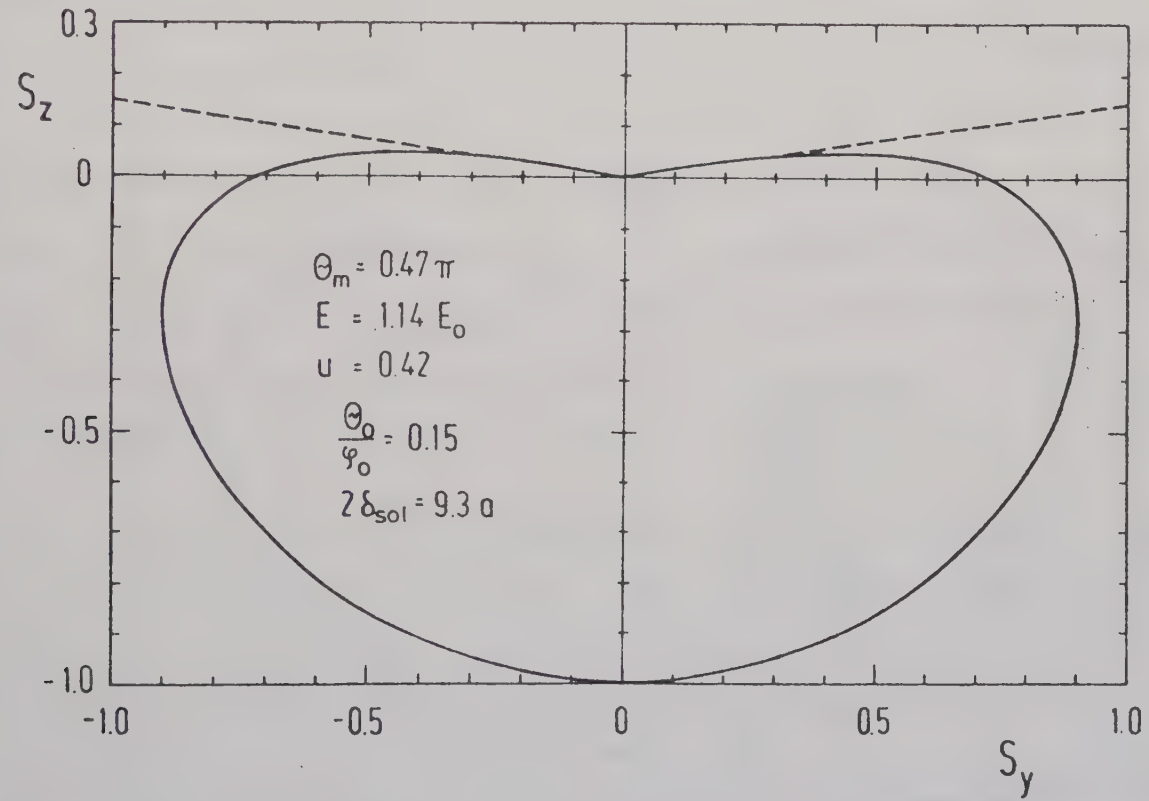


Fig. II.11 Projektion der stationären Trajektorie aus der numerischen Simulation für b = 0.1 und $\Theta_m/\pi = 0.47$ in die y-z-Ebene zusammen mit der entsprechenden Asymptote (-------). Energie E, Geschwindigkeit u sowie die für die Asymptotik charakteristischen Größen $2\delta_{sol}$, Θ_0/φ_0 entsprechen Fig. II.8 bzw Fig. II.3.

iii) $|u| \gtrsim u_1$

Unter Berücksichtigung der in diesem Bereich zusätzlich auftretenden oszillatorischen Ausläufer können wie in Bereich ii) die

Startkonfigurationen wieder verbessert werden. Die in Figur II.12 gezeigte y-z-Projektion für $\theta_m = 0.64\Pi$ zeigt die im Vergleich zu Figur II.11 gekrümmte Asymptote. $\theta_m = 0.64\Pi$ entspricht eine Geschwindigkeit $|u| = 0.9$. Die Wellenlänge der Trägerwelle, $\lambda_{osz} \approx 39$ Gitterabstände (Figur II.3), ist in diesem Bereich von Geschwindigkeiten geringfügig oberhalb u_1 so groß, daß außer der Krümmung einzelne Oszillationen nicht auflösbar sind.

Da also der exponentielle Abfall für $\lambda_{osz} >> \delta_{sol}$ dominiert, ist es immer noch gerechtfertigt, von einer Kette mit 200 Spins auszugehen, obwohl damit lange Wellenlängen, wie sie die Trägerwelle für $|u| \to u_1$ kennzeichnet, ausgeschlossen werden.

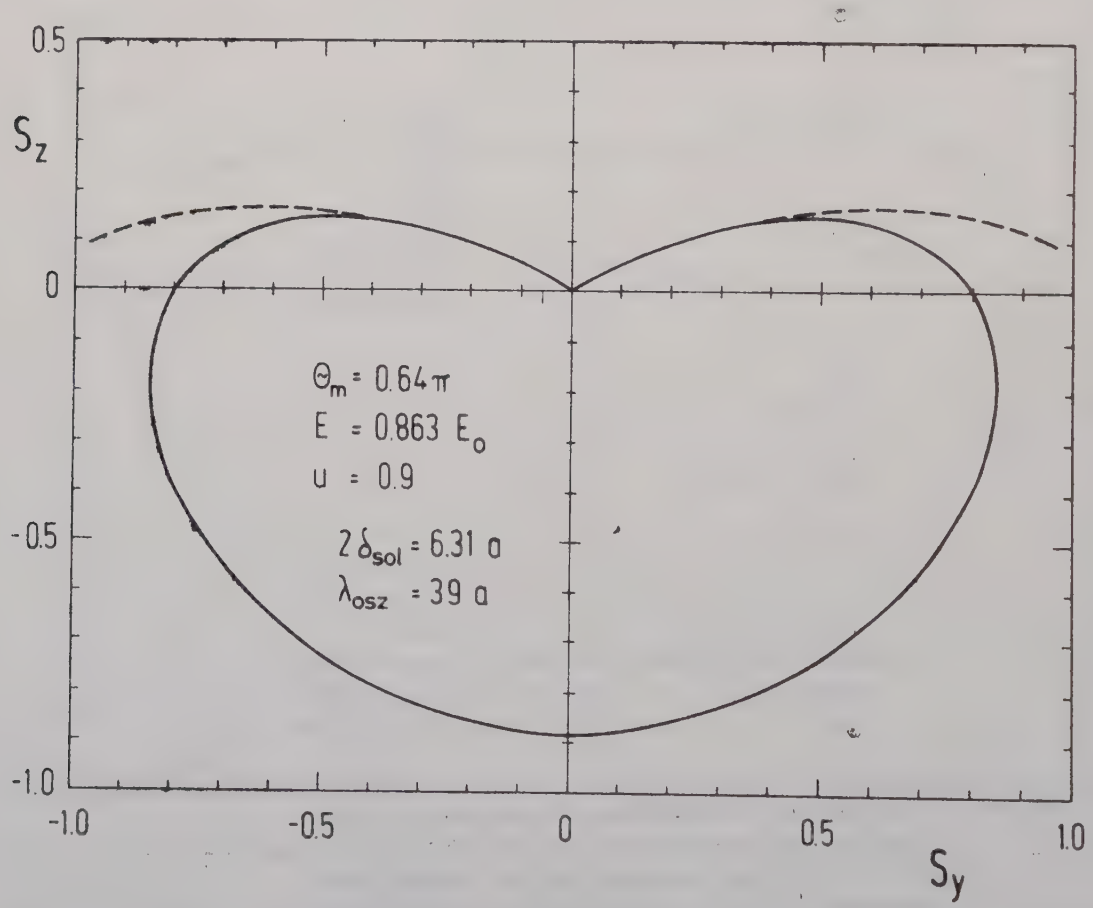


Fig. II.12 Projektion der stationären Trajektorie aus der numerischen Simulation für b = 0.1 und $\Theta_m/\pi = 0.64$ in die y-z-Ebene zusammen mit der entsprechenden Asymptote (-------). Die Parameter entsprechen Fig. II.8 bzw. Fig. II.3.

iv) $\theta_m \to \Pi$, $u \to u_2 = 1.365$

Wie bereits angedeutet, reicht allein für die größten Werte von θ_m der Variationsansatz nicht aus, um Relaxation zu einem stationären Profil zu erzeugen. Aber auch in diesem Fall führt die Berücksichtigung der exakten Asymptotik zu numerisch stabilen Lösungen. Die y-z-Projektion der Lösung mit $\theta_m = 0.87\Pi$ (siehe Fig. II.13) zeigt deutlich die durch die Trägerwelle verursachten stationären, räumlichen Oszillationen. Deutlich werden daneben auch die auf Grund der Anisotropie geringeren Auslenkungen in z-Richtung in Vergleich zu denen in y-Richtung (vgl. Kapitel II 2.2). Fig. II.13 enthält der Übersichtlichkeit halber nur eine Hälfte des Solitons und ist daher symmetrisch zu ergänzen. Der Charakter der Puls-Solitonen-Lösung kommt auch in Fig. II.14, wo S_y als Funktion von Z aufgetragen ist, zum Ausdruck. Neben der Wellenlänge der Trägerwelle stimmt auch δ_{sol} gut mit den zu der entsprechenden Geschwindigkeit u = 1.29 gehörenden Werten aus der asymptotischen Analyse überein.

Auch für $\theta_m = 0.87$ ist die Ausdehnung der Einhüllenden mit fünfzehn Gitterkonstanten noch klein gegen die bei der Simulation verwendete Kettenlänge. Aufgrund der Divergenz der Solitonenbreite im Limes $\theta_m \to \Pi$ kann jedoch die Bestimmung der Grenzgeschwindigkeit nur durch Extrapolation der numerisch bestimmten Kurve E(u) nach E = 0 erfolgen. Wegen der großen Steigung von E(u) für $\theta_m \lesssim \Pi$ ist dies jedoch unproblematisch. Der so erzielte Wert für b = 0.1 ist in guter Übereinstimmung mit der minimalen Phasengeschwindigkeit der Magnonen u_2. Der Variationsansatz überschätzt zwar die Grenzgeschwindigkeit, wichtig ist jedoch die Tatsache, daß er bereits eine endliche Grenzgeschwindigkeit liefert.

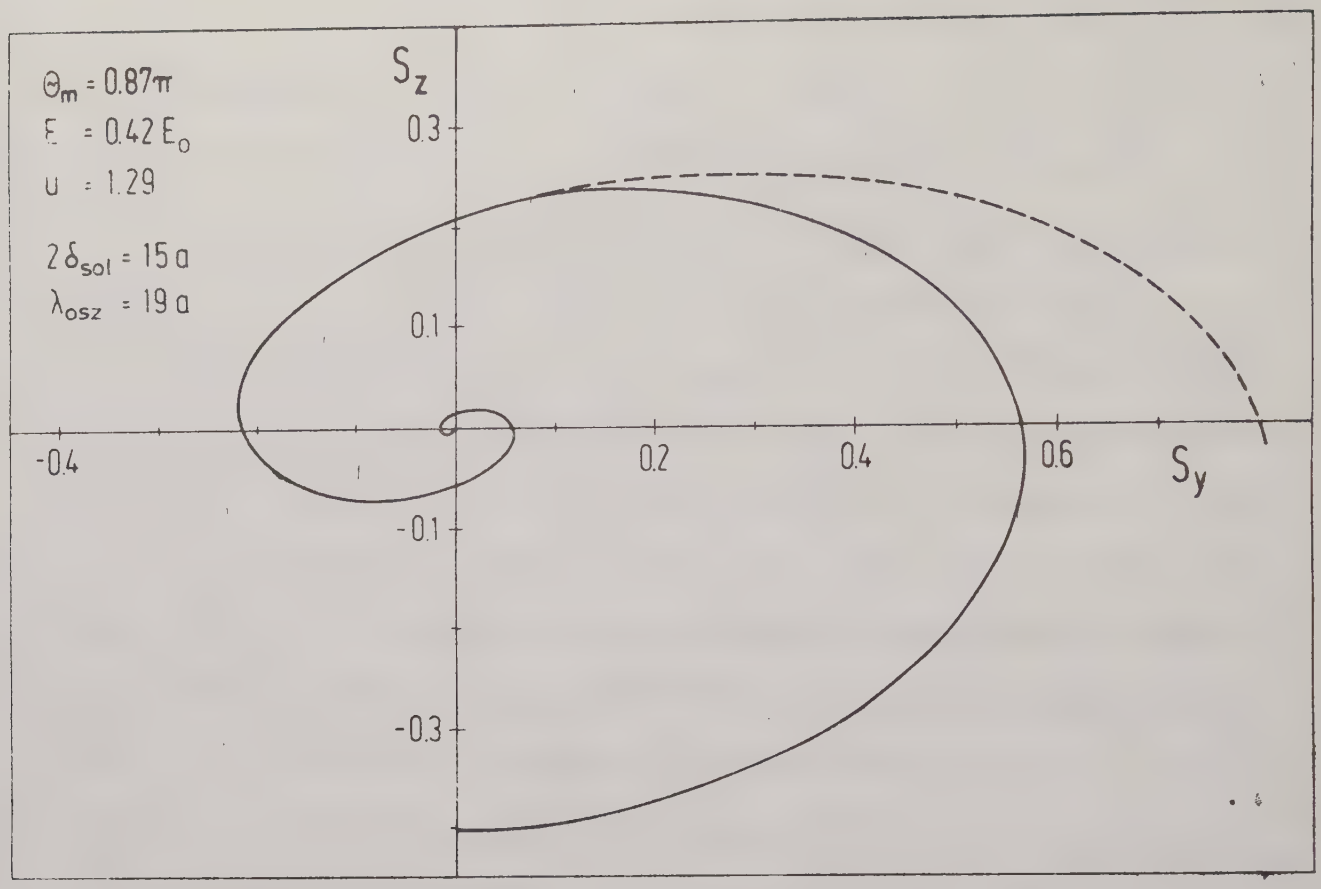


Fig. II.13 Projektion der stationären Trajektorie aus der numerischen Simulation für b = 0.1 und Θ_m/π = 0.87 in die y-z-Ebene zusammen mit der entsprechenden Asymptote (-------). Die Parameter entsprechen Fig. II.8 bzw Fig II.3. Der Übersichtlichkeit halber zeigt die Figur nur eine Hälfte des Solitons und ist symmetrisch zur z-Achse zu ergänzen.

II 4.2 Diskretheitseffekte und Soliton-Soliton-Streuung

Bei der numerischen Simulation von Puls-Solitonen im isotropen Heisenberg-Modell haben Tjon und Wright (1977) Modifikationen von Amplitude und Geschwindigkeit der Kontinuumslösungen gefunden, wenn die diskrete Natur der Spinkette mitberücksichtigt wurde. Eine qualitative Änderung der Resultate aus der Kontinuumstheorie war allerdings nicht zu beobachten. Da für den Fall endlicher Anisotropie keine analytische Lösung vorliegt, ist eine systematische Untersuchung des Einflusses von Diskretheitseffekten auf die in Kapitel II.4.1 geschilderten Ergebnisse nicht möglich. Die bei der numerischen Simulation beobachtete gitterperiodische Modulation der Geschwindigkeit entspricht jedoch der

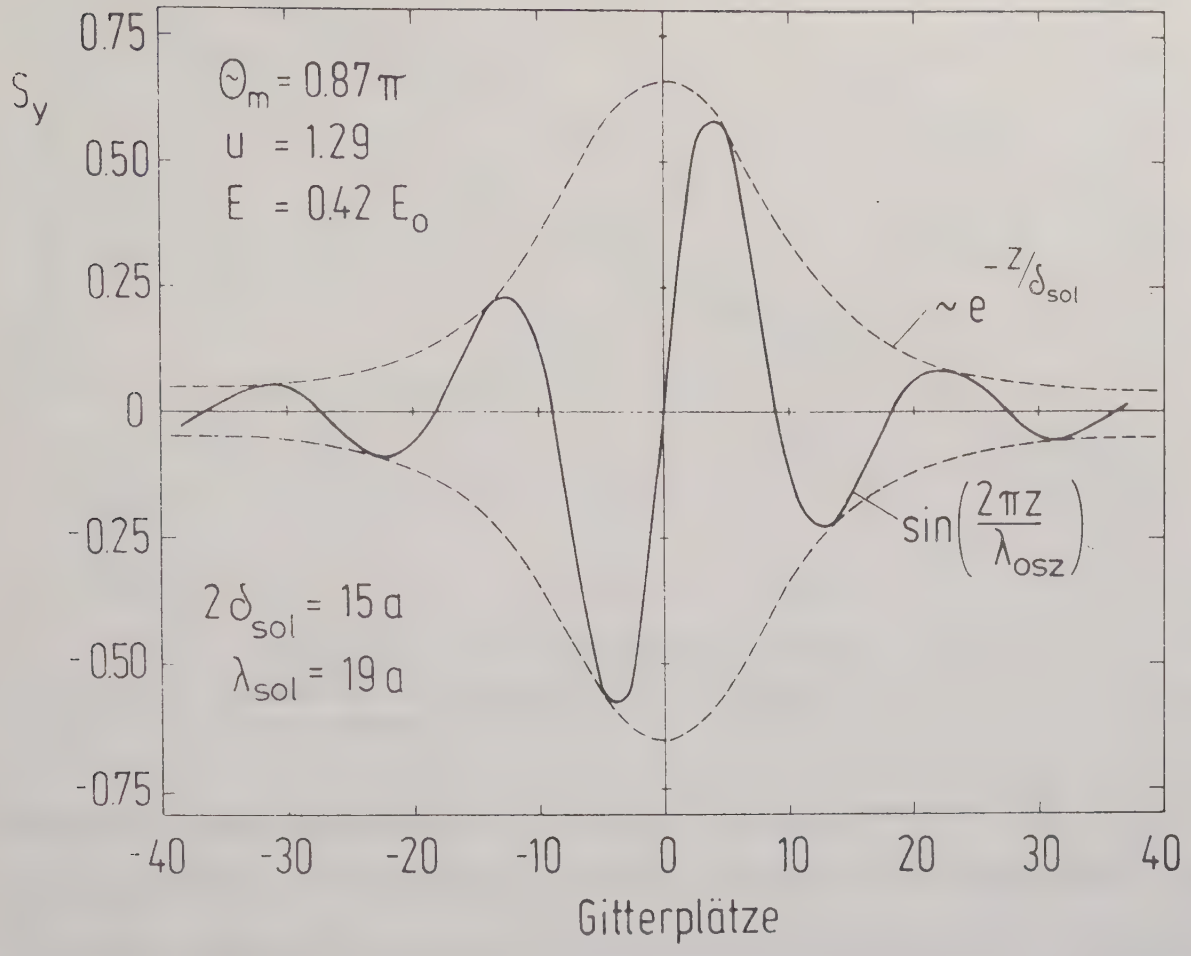


Fig. II.14 S_y als Funktion von Z (———) für die in Fig. II.13 gezeigte Trajektorie. Die entsprechende Einhüllende ist angedeutet (-------).

Vorstellung von der Bewegung eines Solitons in einem gitterperiodischen Peierls-Potential (Kapitel I 4). In jedem Fall ist die Modulation der Geschwindigkeit für Magnetfelder um b = 0.1, ähnlich wie bei SG-Solitonen vergleichbarer Breite in einem diskreten System (Currie et al 1977), jedoch nur gering. Neben der dynamischen Stabilität einzelner Solitonen ist deren gegenseitige Wechselwirkung von Interesse. Wie im SG-Fall nimmt die Geschwindigkeit zweier Solitonen bei ihrer gegenseitigen Annäherung ab, während Soliton und Antisoliton aufeinander zu beschleunigt werden. Entsprechend kann von einer repulsiven bzw. attraktiven Wechselwirkung ausgegangen werden. Erste Ergebnisse zeigen, daß die Soliton-Soliton-Streuung für kleine Geschwindigkeiten und kleine θ_m elastisch bleibt. Die in Figur II.15 am Beispiel von $\theta_m = 0.05$, b = 0.1 dargestellte Schwerpunktsbewegung als Funktion der Zeit

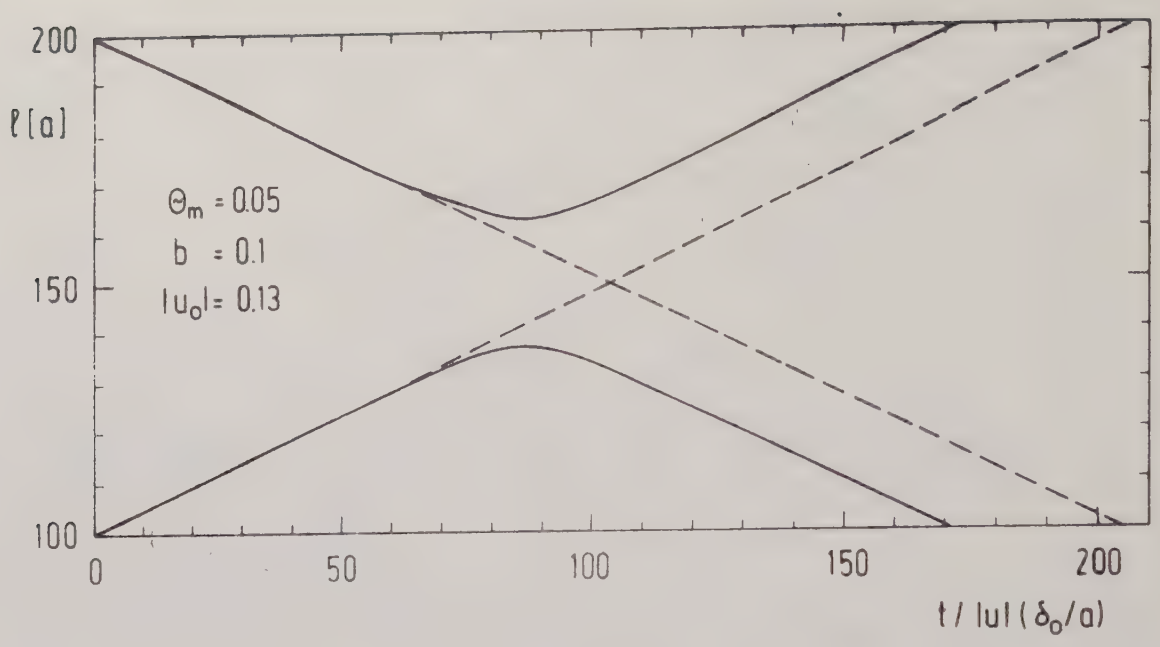


Fig. II.15 Schwerpunktspositionen ℓ (———) in Einheiten der Gitterkonstante a als Funktion der Zeit in Einheiten von $|u|\,\delta_o/a$ für die Soliton-Soliton-Streuung bei $\Theta_m = 0.05$.

zeigt nach der Wechselwirkung lediglich die der Abstoßung entsprechende Schwerpunktsverschiebung entgegen der Bewegungsrichtung. Demgegenüber ist die Soliton-Antisoliton-Streuung ähnlich wie im Falle der φ^4-Theorie inelastisch und führt zur Vernichtung der nichtlinearen Anregungen. Der Zerfallsprozeß läuft dabei gemäß der Vorstellung von der Bildung eines gebundenen Soliton-Antisoliton-Paares ab (Kapitel I 2.3). Daß dieses Ergebnis nicht mit dem Fehlen des die SG-Theorie kennzeichnenden topologischen Erhaltungssatzes zusammenhängt, zeigen die numerischen Ergebnisse von Tjon und Wright (1977) für die Pulssolitonen des isotropen Heisenberg-Modells. Die Details der bei der Soliton-Antisoliton-Vernichtung auftretenden Oszillationen sowie der Einfluß der Startkonfigurationen auf die Streuung sind zwar noch nicht vollständig untersucht; dennoch ergeben die Ergebnisse einen Hinweis darauf, daß der diskrete planare Ferromagnet weder ein integrables System darstellt, noch einem solchen System ähnelt. Wie bei der φ^4-Theorie sind eher ausgeprägte Lebensdauer-Effekte zu erwarten.

Die Integrabilität der SG-Gleichung ist ein Resultat der Konti-

nuumstheorie (Kapitel I 2.3). Für die hier betrachtete Spinkette ist jedoch durch die Gitterkonstante eine natürliche Diskretisierungslänge vorgegeben. Damit ist die Frage nach dem Einfluß der Diskretheit der Spinkette auf die Soliton-Antisoliton-Streuung hier allenfalls von prinzipieller Bedeutung. Zudem kann ja das Magnetfeld nicht beliebig klein gewählt werden (Kapitel I 3). Damit sind extrem breite Solitonen experimentell gar nicht zu realisieren.

Abschließend sei erwähnt, daß für $\theta_m > \theta_m^*$ auch die Soliton-Soliton Streuung inelastisch werden kann, wenn bei der Kollision benachbarte Spins um 2π gegeneinander verdreht werden. Diese zweite Möglichkeit für einen topologischen Zerfallsprozeß hängt mit der Form des Austauschterms I. 19b zusammen und wird in Zusammenhang mit Verunreinigungen in einem SG-Modell diskutiert (Abschnitt IV). Dieser Zerfallsprozeß unterscheidet sich von dem in Figur II.4 veranschaulichten Zerfall und ist nur in einem diskreten System möglich.

II 5 Zusammenfassung

Die Simulation hat gezeigt, daß im planaren Ferromagneten endlicher Anisotropie ein erweitertes Band numerisch stabiler Solitonen, wie es der Variationsansatz voraussagt, existiert, obwohl für diese nichtlinearen Anregungen kein topologischer Erhaltungssatz gilt. Die Lösungen zeigen einen kontinuierlichen Übergang vom SG-Limes ($\theta_m << \pi$) zum Grenzfall Magnon-ähnlicher Anregungen (Puls-Solitonen, für $\theta_m \to \pi$), die vom isotropen Heisenberg-Modell her bekannt sind. Die explizite Geschwindigkeitsabhängigkeit der Solitonenform hängt damit zusammen, daß die Bewegungsgleichungen nicht Galilei-invariant sind. Hinreichend gute

Startbedingungen für die numerische Simulation, wie sie aus dem Variationsansatz gewonnen werden können, sind aus zwei Gründen entscheidend:

i) Zuerst einmal um überhaupt eine Relaxation gegen ein stabiles Profil zu erhalten,

ii) zum anderen, um eine Überschätzung der Solitonenenergie aufgrund zusätzlicher Oszillationen zu vermeiden.

Die endliche Steigung von E(u) bei der zweiten statischen Lösung θ_m^* und die starken Oszillationen, die von Wysin et al (1982) gefunden wurden, scheinen ein Ergebnis unzureichender Startbedingungen zu sein. Die von Schockwellen-Bildung begleitete Begrenzung des Solitonenbandes, wenn $\Theta_m \frac{\Pi}{2}$ erreicht, ist wohl eine Folge davon, daß diese Autoren sphärische Polarkoordinaten verwenden.

Die Relaxation von relativ willkürlichen Startkonfigurationen zu einem stationären Profil liefert einen starken Hinweis auf die Stabilität der untersuchten nichtlinearen Anregungen. Dieses Ergebnis zeigt aber auch, daß aus E(u) bzw. $E(\theta_m)$ nicht, wie zum Beispiel bei Kumar (1982), im Sinne eines Ginzburg-Landau-Funktionals, auf die Stabilität bzw. die Instabilität der Lösungen geschlossen werden kann. Diese Stabilitätseigenschaft der Lösungen unterscheidet den planaren Ferromagneten von dem mechanischen Modell (Kapitel I 1) und geht über die SG-Beschreibung hinaus. Wie Figur II.4 veranschaulicht, ist die Situation ähnlich wie bei einem präzedierenden Kreisel, der senkrecht zu einem äusseren Drehmoment ausweicht. So bewirkt eine kleine Deformation des Solitons (im Rahmen des Variationsansatzes eine Änderung von θ_m) lediglich eine kleine Änderung der Soliton-Geschwindigkeit. In Figur II.4 entspricht dies gerade einer Änderung der "Präzessions-Geschwindigkeit" des Spins entlang der Trajektorie auf der

Einheitskugel. Die Analogie zum präzedierenden Kreisel macht auch klar, warum die von Magyari und Thomas (1983a) vorgeschlagene Einführung einer phänomenologischen Dämpfung keine Zusatzinformation zur Stabilität der Solitonen ergibt. Für $b < b_c$ beispielsweise wird in diesem Fall je nachdem, ob $\theta_m > \theta_m^*$ oder $\theta_m < \theta_m^*$ ist, nur eine Relaxation der Anregung gegen das Magnon minimaler Phasengeschwindigkeit bzw. das statische SG-Soliton erfolgen.
Die Ergebnisse der Simulation der gegenseitigen Wechselwirkung von Solitonen sind ähnlich denen für die φ^4-Theorie (Kapitel I 2.3). Es gibt keinen Hinweis auf eine für nahezu integrable Systeme charakteristische, erhöhte Stabilität bei der Streuung, obwohl die beiden Grenzfälle $\beta \to 0$ und $\beta \to 1$ durch integrable Systeme beschrieben werden.

Das erweiterte Solitonen-Band zeigt, daß für $b < b_c$ immer noch Solitonen mit Teilchencharakter existieren, ohne daß ein topologischer Erhaltungssatz vorliegt. Anstelle eines solchen Erhaltungssatzes gibt es bei endlicher Anisotropie für Solitonen mit $\theta_m < \theta_m^*$ eine Energiebarriere für den topologischen Zerfall in Puls-Solitonen (Figur II.7). Diese Anregungen verhalten sich damit unter dem Einfluß von Dämpfung wie die topologischen Solitonen der SG-Theorie (Kapitel I 2.1) und relaxieren gegen das statische SG-Soliton. In diesem Sinne liefert die "Stabilitätsanalyse" von Magyari und Thomas (1982) für das statische SG-Soliton zwar keinen Aufschluß über dessen dynamische Stabilität, das kritische Magnetfeld begrenzt jedoch augenscheinlich den Bereich, in dem Lösungen mit Teilchencharakter existieren. Die Variation des Solitonen-Bandes als Funktion der Stärke der Anisotropie vervollständigt das Bild von den möglichen nichtlinearen Anregungen im planaren Ferromagneten. Mit abnehmender Anisotropie wird das Solitonen-Band der SG-Theorie kontinuierlich in das Band der Puls-Solitonen des isotropen Heisenberg-Modells deformiert.

Die von Bishop (1980) geäußerte Vermutung, daß beim Übergang vom SG-Modell zum isotropen Heisenberg-Modell Pulsatonen in Puls-Solitonen deformiert werden,kann damit wohl nicht aufrechterhalten werden. Vielmehr sind SG-Solitonen und Puls-Solitonen kontinuierlich verknüpft, wobei statisches SG-Soliton und statisches Puls-Soliton (abgesehen von der Rotationsinvarianz der Lösungen des isotropen Heisenberg-Modells in der y-z-Ebene) sogar in Form und Energie übereinstimmen. Der Punkt $\frac{E}{E_o} = 1$, $u = 0$ des Bandes ist daher unabhängig von b und die dazugehörende Energie $E_o E^*$ skaliert gemäß $\sqrt{g\mu_o B/J}$. (Auch das statische SG-Soliton ist wegen $\theta_m \equiv 0$ unabhängig von der Anisotropie!)

Der letztgenannte Punkt ist der Grund dafür, daß zur experimentellen Bestimmung des Solitonen-Bandes die Messung der Kernspin-Relaxationszeit wenig geeignet ist. Die Hyperfeinwechselwirkung zwischen Kernspin und Soliton ist nur während einer Zeit $\tau \sim \frac{1}{u}$ effektiv wirksam (Goto und Yamaguchi 1981) und deshalb tragen nur Solitonen mit $u \gtrsim 0$ zur Relaxation des Kernspins bei (Hackenbracht und Schuster 1983b). Das sind aber gerade die Solitonen mit der Modell-unabhängigen Energie $E_o E^*$, da die zweite statische Lösung als Folge des Boltzmannfaktors bei tiefen Temperaturen einen vergleichsweise geringen Beitrag liefert. Damit ist auch verständlich, warum sich die Relaxationszeit bis hin zu sehr großen Magnetfeldern nur gemäß $\sqrt{B}$ verändert (Goto und Yamaguchi 1981, Seitz et al 1983).

Besser geeignet ist die Neutronen-Streuung, mit der Frequenz- und Wellenzahlabhängigkeit des dynamischen Strukturfaktors bestimmt werden können. Die Form dieser Größe in der Näherung unabhängiger Solitonen (Anhang):

$$S(q,\omega) \propto e^{-\beta E(u)} \{ M(q,u) \}^2 \frac{1}{u} \frac{\partial E}{\partial u} \Big|_{u=\frac{\omega}{q}} \qquad \text{II.35}$$

zeigt den in Kapitel I 2.3 angesprochenen Zusammenhang mit der

Energie-Geschwindigkeits-Relation E(u) sowie über den Formfaktor M(q,u) mit der Form der Solitonen. Wie für das Heisenberg-Modell, so gibt es auch für den planaren Ferromagneten noch keine vollständige thermodynamische Beschreibung. Dennoch ist davon auszugehen, daß die teilchenartigen Solitonen ($\theta_m < \theta_m^*$) auf Grund ihrer Ähnlichkeit zu topologischen Solitonen einen vergleichbaren Beitrag zum Strukturfaktor liefern (vgl. Kapitel I 2.2). Da die Ernergiebarriere für ein typisches Magnetfeld der Größenordnung 5 KG in der Größenordnung von 10^{o}K liegt, damit also deutlich größer als die Anisotropieenergie ($A/k_B \approx 5K$) ist, wird verständlich, daß bei tiefen Temperaturen schon die SG-Theorie die wesentlichen Züge von Temperatur- und Magnetfeldabhängigkeit der experimentellen Daten beschreibt. Die von Steiner (1979b) diskutierten, relativistischen Korrekturen spielen allerdings keine Rolle. Die geringen Unterschiede der Form der SG-Lösungen von den entsprechenden exakten Lösungen (Kapitel II 4) sind auf Grund des beschränkten Auflösungsvermögens experimentell kaum nachweisbar. Die Übereinstimmung der neuesten Werte (Kakurai und Steiner 1983) mit den Voraussagen des isotropen Heisenberg-Modells ist jedoch deutlich schlechter. Dies liefert ein Indiz dafür, daß die Eigenschaften von $CsNiF_3$ durch das isotrope Modell nicht ausreichend beschrieben werden können.

Abweichungen von der SG-Beschreibung sollten sich im Prinzip durch Wurzelsingularitäten bemerkbar machen, die den Punkten von E(u) mit vertikaler Tangente entsprechen. Neben den schon von Magyari und Thomas (1982) diskutierten Singularitäten bei $\omega_{c,1} = \pm qu_c(b)$ sind für das erweiterte Band noch Singularitäten bei $\omega_{c,2} = \pm qu_2$ zu erwarten. Diese Singularitäten und damit auch die zusätzlichen Beiträge oberhalb $|\omega_{c,1}|$, die allein auf die Puls-Solitonen zurückgehen, liegen allerdings zumindest für experimentell relevante Magnetfelder in den Flanken von $S(q,\omega)$. Für die Bestimmung sind daher möglicherweise Messungen mit pola-

risierten Neutronen notwendig. Damit können die überlagerten, wegen der starken Fluktuationen in 1D Systemen sehr breiten Magnonenresonanzen unterdrückt werden. Eine weitere Unterscheidung zwischen Modellsystemen sollte durch die Berechnung von Renormierungen zum theoretischen Energiewert $E_o E^*$ für das statische Soliton möglich sein (Kapitel I 2.2). Der Untersuchung dieser Renormierungen kommt besonders auch deshalb Bedeutung zu, da die Diskrepanz der theoretischen Werte für die Soliton-Ruheenergie zu den experimentellen Werten bisher ebensowenig geklärt ist, wie der mögliche Einfluß von Quanteneffekten (Kapitel I 3). Im Moment liegen dazu nur kontroverse Ergebnisse verschiedener Autoren vor (Riseborough und Trullinger 1980, Kumar und Samalam 1982, Maki 1981a, Mikeska 1982, siehe auch Abschnitt V).

III Magneto-elastische Wechselwirkung

Die in Kapitel I 3.1 eingeführten Hamiltonfunktionen stellen eine phänomenologische Beschreibung der 1D magnetischen Systeme dar, die sich daraus rechtfertigt, daß sich jeweils im Rahmen dieser Beschreibung die experimentellen Ergebnisse zu Spinwellendispersion, magnetischem Anteil der spezifischen Wärme etc. beschreiben lassen. Zugrunde liegt dabei die vereinfachende Annahme, daß die magnetischen Ionen an Plätzen bestimmter Symmetrie in einem starren Gitter lokalisiert sind. In Hinblick auf die Frage, inwieweit die Ergebnisse speziell zu Solitonen von dieser Annahme abhängen, ist es interessant, die elastischen Freiheitsgrade des Gitters mit zu berücksichtigen.

Kristallfeld-Potential und Austauschwechselwirkung hängen von den

Gitterplätzen der benachbarten Ionen und den Abständen zwischen den Ionen ab. Auslenkungen der Ionen aus ihrer Gleichgewichtslage führen daher zu Änderungen der Modellparameter in der entsprechenden Hamiltonfunktion. Die Modulation von Austauschwechselwirkung etc. bewirkt deshalb eine Wechselwirkung zwischen den elastischen und den magnetischen Freiheitsgraden des Gitters, die als magneto-elastische Wechselwirkung (oder auch Spin-Gitter-Wechselwirkung) bezeichnet wird.

Die Ursache für die Austauschwechselwirkung ist im allgemeinen in einem Überlapp der elektronischen Wellenfunktionen der Ionen zu suchen. Bei einer Verringerung der inter-atomaren Abstände ist deshalb aufgrund des zunehmenden Überlapps der Wellenfunktionen eine Zunahme des Austauschintegrals und damit ein Energiegewinn bezüglich des magnetischen Anteils der Energie zu erwarten. Bei einer Änderung des durch den elastischen Anteil der Energie festgelegten Gleichgewichtsabstands wird jedoch die elastische potentielle Energie des Gitters zunehmen. Die inter-atomaren Abstände ergeben sich daher aus der entsprechenden Konkurrenz der magnetischen und der elastischen Energie. Eine Zunahme der magnetischen Korrelationen führt deshalb zu einer Kontraktion des Gitters. Die magneto-elastische Wechselwirkung gibt darüberhinaus auch Anlaß zu anomalen thermischen Eigenschaften magnetischer Substanzen. Nach den normalen thermischen Eigenschaften, die aus der anharmonischen Gittertheorie folgen (Leibfried und Ludwig 1961), ist mit einer Kontraktion des Kristalls bei abnehmender Temperatur eine Versteifung und damit eine Zunahme der elastischen Konstanten verbunden. In Gegensatz dazu kann die magneto-elastische Kopplung nun dazu führen, daß die elastischen Konstanten mit abnehmender Temperatur als Folge zunehmender magne-

tischer Korrelationen kleiner werden (siehe z.B. Lines 1977). Die Tatsache, daß in dreidimensionalen Systemen die Änderung der magnetischen Korrelationen im wesentlichen auf einen kleinen Temperaturbereich um die Übergangstemperatur des magnetischen Phasenübergangs beschränkt ist, ist der Grund dafür, daß die magneto-elastische Wechselwirkung für die meisten Problemstellungen in dreidimensionalen Systemen keine Rolle spielt und die Annahme eines starren Gitters gerechtfertigt ist.

Aus dem in Kapitel I 3 gezeigten magnetischen Anteil der spezifischen Wärme von $CsNiF_3$ wird deutlich, daß die magnetischen Korrelationen jedoch in 1D Systemen, wo allein eine kurzreichweitige Ordnung auftritt, in einem vergleichsweise großen Temperaturbereich oberhalb T = 0 vorliegen. Wichtiger für die Solitonen ist darüberhinaus die Tatsache, daß ein Soliton immer aus korrelierten Spins besteht, was Anlaß zu einer magneto-elastischen Verzerrung geben sollte. Interessant ist deshalb, inwieweit das Konzept der Solitonen mit der Berücksichtigung elastischer Freiheitsgrade verträglich ist. Die räumlich homogenen Vakua für die magnetischen Freiheitsgrade bleiben auch bei Berücksichtigung der magneto-elastischen Wechselwirkung erhalten. Damit ist zu erwarten, daß bei einem kontinuierlichen Einschalten dieser Wechselwirkung Solitonen, die asymptotisch den Vakua entsprechen, erhalten bleiben und allenfalls verformt werden. Dieses Argument hängt nicht davon ab, ob die entsprechenden Vakua verschieden sind und damit ein topologischer Erhaltungssatz vorliegt oder nicht. Gegebenenfalls ist dann der Einfluß von Solitonen auf die elastischen Eigenschaften bzw. umgekehrt der Einfluß von Gitterschwingungen auf Form und Dynamik der Solitonen zu untersuchen.

In diesem Abschnitt wird nun gezeigt (Schöbinger und Jelitto 1981),

daß das Solitonen-Konzept mit der magneto-elastischen Wechselwirkung kompatibel ist. Erwartungsgemäß ist die Bewegung eines Solitons jedoch von einer entsprechenden simultan propagierenden Deformation des Gitters begleitet. Diese Deformation hat zur Folge, daß die Solitonenbewegung gedämpft wird. Bei Schöbinger und Jelitto (1981; im Folgenden als SJ bezeichnet) wird eine 1D kompressible Spinkette behandelt. Obwohl die Beschränkung auf ein räumlich eindimensionales System eigentlich nur für die magnetischen Freiheitsgrade gerechtfertigt ist, wird durch dieses einfache Modell der Einfluß der Volumenabhängigkeit des Austauschintegrals, auf dem man sich in erster Näherung beschränken kann, qualitativ richtig simuliert. Es zeigt sich darüberhinaus, daß für die interessierende Fragestellung auch die unrealistische Zustandsdichte des eindimensionalen Modells, die sich in Form einer Singularität am Rand der Brillouinzone bemerkbar macht, keine Rolle spielt. Schließlich läßt sich auch diskutieren, inwieweit sich die diskrete Natur des Systems in den Ergebnissen manifestieren kann (vgl. Theodorakopoulos et al 1980, sowie Kapitel I 4).

III 1 Das eindimensionale Modell

Für eine monoatomare Kette läßt sich die elastische potentielle Energie als Summe von Nächst-Nachbar-Potentialen $\phi(y)$ schreiben:

$$H_{el} = \sum_n \phi(a + u_{n+1} - u_n) \qquad \text{III.1a}$$

Die Gleichgewichtsgitterkonstante a ist durch

$$\left.\frac{d\phi}{dy}\right|_{y=a} = 0 \qquad \text{III.1b}$$

definiert und die Auslenkung des Atoms n von seiner Gleichgewichtslage wird mit u_n bezeichnet. Unter Berücksichtigung der elastischen Freiheitsgrade lautet der ferromagnetische Heisenberg-Hamiltonian für die 1D Spinkette

$$H_S = \sum_n J(a + u_{n+1} - u_n)\, \vec{S}_n \vec{S}_{n+1} \quad , \qquad \text{III.2}$$

wobei im Weiteren nur der Fall klassischer Spins interessiert. $H = H_S + H_{el}$ stellt das 1D Modell für die Spin-Gitter-Wechselwirkung dar. Für eine gegebene magnetische Anregung ergibt sich eine spontane Gitterverzerrung, die durch das Minimum der Gesamtenergie bestimmt ist. Diese Gleichgewichtsbedingung ist äquivalent zu der Forderung, daß keine in den Auslenkungen der Atome linearen Terme in der Hamiltonfunktion auftreten sollen. Die resultierenden neuen Abstände $a + \Delta_{n+1,n}$ zwischen den Atomen hängen von $\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}$ ab.

Der Fall einer 1D kompressiblen Heisenberg-Kette wurde für klassische Spins von Lee (1973) und Barma (1975, 1977) in erster Ordnung in der Spin-Gitter-Wechselwirkung behandelt. In dieser Ordnung entkoppeln Spin- und Gittersystem und es resultiert eine homogene Verzerrung der Spinkette. Im allgemeinen ist jedoch die Spin-Gitter-Wechselwirkung beliebiger Ordnung in den Auslenkungen zu berücksichtigen, da sonst eine Renormierung der elastischen Konstanten ausgeschlossen wird.

Wenn das Spinsystem in seinem translationsinvarianten, klassischen Grundzustand ist ($\vec{S}_n \vec{S}_{n+1} = S^2$), ergibt sich die maximale homogene Verzerrung Δ_o. Sie bestimmt sich aus

$$-S^2 J'(a + \Delta_o) + \phi'(a + \Delta_o) = 0 \qquad \text{III.3a}$$

wobei $f^{(n)}(y)$ die n-te Ableitung von f(y) bezeichnet. Zusammen mit III.1b folgt daraus in niedrigster Ordnung in Δ_o

$$\Delta_o = \frac{S^2 J'(a)}{\phi''(a) - S^2 J''(a)} \qquad \text{III.3b}$$

Mit $J' < 0$ und $\phi'' >> J''$ stellt Δ_o die der Volumenkontraktion im dreidimensionalen System entsprechende Längenkontraktion der Spinkette dar. Diese Längenkontraktion läßt sich durch Übergang zu einer renormierten Gitterkonstante $\tilde{a} = a + \Delta_o < a$ berücksichtigen.

Magnetische Anregungen über dem homogenen Grundzustand sind durch

$$S^2 g_{n,n+1} = S^2 - \vec{S}_n \vec{S}_{n+1} \qquad \text{III.4a}$$

charakterisiert. Im langwelligen Grenzfall ($n\tilde{a} \to x$, $\vec{S}_n \to \vec{S}(x)$) ergibt sich in führender Ordnung für diesen Ausdruck

$$S^2 g_{n,n+1} = S^2 g(x) = \frac{(a\vec{S}'(x))^2}{2} \qquad \text{III.4b}$$

Die Beschränkung auf den führenden Term hat zur Konsequenz, daß konsistenter Weise im Folgenden nur Terms linear in g(x) zu berücksichtigen sind. Für eine einzelne solitäre Welle $\vec{S}_K(x)$ ist III.4b nur im Bereich ihrer Ausdehnung wesentlich von Null verschieden. Daraus folgt eine inhomogene Verzerrung $\tilde{\Delta}_{n,n+1}$ ($\Delta_{n,n+1} = \Delta_o + \tilde{\Delta}_{n,n+1}$) der Kette bezüglich der Gitterkonstanten $\tilde{a}$

$$\tilde{\Delta}_{n,n+1} \propto (\vec{S}_K' \tilde{a})^2 \quad , \qquad \text{III.5a}$$

die auf den gleichen Bereich konzentriert ist. Bei der Herleitung des exakten Ausdrucks (siehe SJ) ist zu berücksichtigen, daß g für

eine solitäre Welle von J und damit von den inter-atomaren Abständen abhängt. Erfahrungsgemäß sind magneto-elastische Verschiebungen klein gegen die Gitterkonstante, da die Spin-Gitter-Wechselwirkung im allgemeinen klein gegen die elastische Kopplung der Ionen ist. Deshalb kann bei einer räumlich nur gering variierenden Spinkonfiguration $\vec{S}_K(x)$ auch die inhomogene Verzerrung durch ein kontinuierliches Verzerrungsfeld η

$$\tilde{\Delta}_{n,n-1} \rightarrow \tilde{a}\,\eta'(x) \qquad \text{III.5b}$$

beschrieben werden.

Streng genommen gilt III.5a nur für den statischen Fall. Außer für extreme Geschwindigkeiten ist jedoch die Annahme gerechtfertigt, daß sich die Gitterverzerrung instantan einstellt, daß sich also solitäre Welle und inhomogene Verzerrung mit gleicher Geschwindigkeit entlang der Kette bewegen. Die Verzerrung η' ist dann allein eine Funktion von $\zeta = x - vt$ und bestimmt sich aus dem zu K in Kapitel II 1.1 entsprechenden Funktional, in dem auch die kinetische Energie berücksichtigt ist. Aufgrund der Lorentzinvarianz des elastischen Hamiltonian findet man im dynamischen Fall lediglich einen Korrekturfaktor

$$\gamma_{kin}^{-2} = \left(1 - \frac{v^2}{c_s^2}\right) \qquad \text{III.5c}$$

zur rechten Seite von III.5b:

$$\tilde{a}\,\eta'(x) \rightarrow \gamma_{kin}^{-2}\,\tilde{a}\,\eta'(\zeta)\ . \qquad \text{III.5d}$$

Solange die Geschwindigkeit der solitären Welle nicht in der Größenordnung der Schallgeschwindigkeit c_S liegt, ist diese Korrektur vernachlässigbar und die Resultate von SJ führen zu

keiner Unterbewertung der Spin-Gitter-Wechselwirkung.

Der effektive Hamiltonian für eine auf einer kompressiblen Kette propagierende solitäre Welle ergibt sich durch den Übergang von den Auslenkungen $\{u_n\}$ zu den Auslenkungen $\{\xi_n\}$ um die neuen Gleichgewichtslagen:

$$u_{n+1} - u_n = \xi_{n+1} - \xi_n + \Delta_{n,n+1} \qquad \text{III.6}$$

Bis zur zweiten Ordnung in den Auslenkungen hat dann der Hamiltonian die Gestalt

$$H = \tilde{H}_S + \tilde{H}_{el} + \tilde{H}_{ww} \qquad \text{III.7}$$

mit

$$\tilde{H}_S = \sum_n J(\tilde{a})\, S^2\, g(\zeta) \qquad \text{III.7a}$$

$$\tilde{H}_{el} = \sum_n \frac{\tilde{K}}{2} (\xi_n - \xi_{n+1})^2 \qquad \text{III.7b}$$

$$\tilde{H}_{ww} \approx \sum_n \Gamma\, g(\zeta)\, (\xi_n - \xi_{n+1})^2 \qquad \text{III.7c}$$

wobei $\zeta = n\tilde{a} - vt$. $\tilde{K}$ ist die effektive Federkonstante im Grundzustand der kompressiblen Kette

$$\tilde{K} = \phi''(\tilde{a}) - S^2 J''(\tilde{a})$$

unter Berücksichtigung der Spin-Gitter-Kopplung bis zur zweiten Ordnung. $\tilde{H}_{ww}$ liefert eine phänomenologische Beschreibung der Kopplung zwischen solitärer Welle und Gitterschwingungen. Sie ist im wesentlichen durch $g(\zeta)$ charakterisiert. Darüberhinausgehende Details (vgl. SJ) spielen , wie Kapitel III 4 zeigen wird, keine Rolle. In die Kopplungskonstante Γ geht J'' linear und J' quadratisch ein (vgl. Lines 1977), letztere aufgrund der Abstandsabhängigkeit von g. Am Beispiel des 1D Modells zeigt sich

darüberhinaus, daß auch die Anharmonizität des elastischen Potentials aufgrund der Inhomogenität der Verzerrung zu der Kopplung in zweiter Ordnung beiträgt (SJ). Entsprechend der oben angesprochenen im allgemeinen schwachen Spin-Gitter-Wechselwirkung kann man von einer Größenordnung $\frac{\Gamma}{\chi K} = 0.01$ für die Kopplungskonstante ausgehen.

Um das Modell vollständig zu definieren, sind noch die Randbedingungen für den Hamiltonian III.7 festzulegen. Salinas (1973) hat am Beispiel des Ising-Modells mit linearer Spin-Gitter-Kopplung gezeigt, daß die Eigenschaften des Hamiltonian von den äußeren Zwangsbedingungen abhängen. Periodische Randbedingungen für die $\{u_n\}$ legen die Kettenlänge fest und unterdrücken so die thermische Ausdehnung. Um dieses Problem zu vermeiden, werden periodische Randbedingungen für die $\{\xi_n\}$ angenommen. Dies entspricht der experimentellen Situation, bei der sich die Gleichgewichtswerte der Verzerrungen zu vorgegebenen äußeren Spannungen einstellen.

Wenn man die nichtlineare Spin-Gitter-Wechselwirkung vernachlässigt und zusätzlich annimmt, daß g unabhängig von den interatomaren Abständen ist, ergeben sich die Resultate von Cieplak und Turski (1980). In diesem Fall ist $\tilde{H}_{ww} = 0$ und der Hamiltonian III.7 beschreibt die ungestörte Bewegung der solitären Welle und harmonische Gitterschwingungen jeweils bezüglich einer homogenen verzerrten Kette mit Gitterkonstante $\tilde{a}$. Die renormierte Austauschkonstante bei Cieplak und Turski (1980) ist gerade äquivalent zum Übergang von J(a) zu $J(\tilde{a})$ in niedrigster Ordnung in Δ_o.

Das wesentliche Resultat von SJ ist, daß die für die nichtlineare Spindynamik relevante Form des Spin-Hamiltonian (Gl. III.2 ohne die mittels III.3a zu eliminierende klassische Grundzustandsenergie)

erhalten bleibt. Korrekturen zu III.7a sind von der Ordnung g^2 und damit vernachlässigbar. Die Kompatibilität von nichtlinearer Spindynamik (auch der SG-Beschreibung) und Spin-Gitter-Wechselwirkung ist also an den Kontinuumslimes gebunden. Erst diese nachgewiesene Forminvarianz von H_S rechtfertigt die separate Behandlung des Einflusses einzelner solitärer Wellen (z.B. Gl.III.5a), da damit auch die Integrabilität bzw. der topologische Erhaltungssatz des Spin-Teilproblems gewährleistet ist. Schwieriger (und bisher noch nicht gelungen) ist der Nachweis von topologischen Solitonen für eine Spin-Gitter-Kopplung beliebiger Stärke, sowie für den Fall extremer schmaler solitärer Wellen. Einen möglichen Zugang zu dieser Problemstellung hat Magyari (1982) am Beispiel des isotropen Heisenberg-Modells vorgestellt. Unabhängig davon, daß das spezielle Beispiel nicht konsistent ist (mit der zugrundeliegenden Näherung gemäß Gl. III.4b im Austauschterm werden Größen von gleicher Ordnung wie die betrachteten Korrekturen nicht berücksichtigt), ergibt die Methode einen Hinweis darauf, daß die Solitonen auch bei starker Spin-Gitter-Wechselwirkung erhalten bleiben.

III 2 Modellsysteme

Die nichtlineare Spindynamik der verschiedenen Modellsysteme kann nach dem Ergebnis von Kapitel III 1 allein im Rahmen des effektiven Spin-Hamiltonian $\tilde{H}_S$ (Gl. III.7a) beschrieben werden. (Wegen der tiefen Temperaturen, bei denen die nichtlineare Dynamik relevant ist, spielt der von der Phononenbesetzungszahl abhängige Zusatzterm aus III.7c keine Rolle.) $\tilde{H}_S$ ist lediglich noch um die lo-

kalen Spinterme zu ergänzen. Diese Vorgehensweise ist von Fivez (1982) zu Unrecht unter dem Hinweis auf die explizite Zeitabhängigkeit der Transformation III.6 kritisiert worden. Die Behandlung der Dynamik von Fivez ausgehend von III.1a und III.2 ist äquivalent zur Verwendung des Gl. II.5 entsprechenden Funktionals und führt lediglich auf den in Kapitel III 1 diskutierten Korrekturfaktor III.5c.

Die inhomogene Verzerrung durch eine solitäre Welle $\vec{S}_K(\zeta)$ (Gl. III.5a) ist durch $g(\zeta)$ (Gl. II. 4b) und die Abhängigkeit dieser Größe vom Austauschintegral J bestimmt. In sphärischen Polarkoordinaten (vgl. Kapitel II 1.2) ergibt sich:

$$g(\zeta) = \frac{1}{2}(\theta'^2 + \varphi'^2 \sin^2\theta) \qquad \text{III.8}$$

Daraus folgt beispielsweise im SG-Limes des planaren Ferromagneten mit $g(\zeta) \simeq \frac{\varphi'^2}{2}$

$$g(\zeta) = \frac{2}{D}\,\mathrm{sech}^2\frac{\zeta}{D} \qquad \text{III.9}$$

wobei die für die Ausdehnung des Solitons charakteristische Größe D im Falle von $CsNiF_3$ durch $D^{CsNiF_3} = (JS/g\mu_B B)^{1/2}$ gegeben ist (siehe Kapitel I 3). Im Rahmen des Variationsansatzes (Gl. II.25) für die Solitonen im planaren Ferromagneten ergibt sich mit $D_V = \{ \frac{\delta_o^2}{a^2(3s^2/2 + b)} \}^{1/2}$ anstelle von D^{CsNiF_3} (c,s s. Gl. II.25)

$$g(\zeta) = \frac{c^2\phi'^2}{2} = \frac{2c^2}{D_V}\,\mathrm{sech}^2\frac{\zeta}{D_V} \qquad \text{III.10}$$

und damit wegen $\lim_{\theta_m \to o} D_V = D^{CsNiF_3}$ und $\lim_{\theta_m \to o} c = 1$ kein wesentlicher Unterschied zu II.9 für die Solitonen mit $\theta_m << \Pi$. III.10 zeigt jedoch darüberhinaus, daß für $\theta_m \to \Pi$ mit abnehmender Amplitude der nichtlinearen Anregungen erwartungsgemäß auch die inhomogene Verzerrung verschwindet.

Wie aus Kapitel I 3 zu entnehmen ist, ist III. 9 nicht nur auf die 2 π - Kinks des planaren Ferromagneten beschränkt. Für eine Blochwand in einem uniaxialen Ferromagneten hat man lediglich $D^{Enz} \propto (J/A)^{1/2}$ zu verwenden. Da für die genannten Modellsysteme die Solitonenbreite Ausdruck der gleichen physikalischen Situation ist (Konkurrenz zwischen Austausch- und lokaler Energie), hängt auch g wegen $\frac{\partial g}{\partial J} = \frac{\partial g}{\partial D} \frac{\partial D}{\partial J}$ und $\frac{\partial D}{\partial J} = \frac{D}{2J}$ in allen Fällen in gleicher Weise von J ab.

Nur geringfügig anders ist die Situation für den planaren Antiferromagneten (z.B. TMMC; Kapitel I 3). Die effektive lokale Anisotropie des äquivalenten uniaxialen Ferromagneten hängt selbst von J ab. Mit $D \sim J$ und $\frac{\partial D}{\partial J} = \frac{D}{J}$ resultiert daraus jedoch nur ein anderer Zahlenfaktor für die Ableitung von D nach J.

Insgesamt erhält man also mit III.9 aus dem in Kapitel III 1 eingeführten Modell eine Beschreibung für die Kopplung topologischer oder diesen verwandter Solitonen an die elastischen Freiheitsgrade, die unabhängig von den Details der zugrunde liegenden Modellsystemeist. (Das bedeutet natürlich nicht, daß nicht auch andere solitäre Wellen, z.B. nach III.10, im Rahmen dieses Modells behandelt werden können.)

III 3 Die Phonon-Soliton-Wechselwirkung

Die in Kapitel III 2 diskutierten Spinmodelle wurden im Rahmen der Kontinuumsnäherung beschrieben, da die Breite der resultierenden Solitonen im allgemeinen groß gegen die Gitterkonstante ist. Das gilt damit auch für die aus der Spin-Gitter-Wechselwirkung resultierende inhomogene Verzerrung des Gitters im Bereich

des Solitons. Um wie im Falle der Magnonen (vgl. Kapitel I 4 und Theodorakopoulos et al 1980) den Einfluß der Dispersion nicht von vorneherein auszuschließen, wird bei der Behandlung der Phononen zunächst von einer diskreten Kette ausgegangen. $\tilde{H}_{ww}$ läßt sich in der üblichen Weise durch Phononenerzeugungs- und -vernichtungsoperatoren ausdrücken, die durch

$$\xi_n = \sum_k \left(\frac{\hbar}{2NM\omega_k} \right)^{1/2} e^{ikR_n} \left(a_k + a_{-k}^{\dagger}\right) \qquad \text{III.11a}$$

definiert sind. N bedeutet hier die Zahl der Atome der Kette und M deren Masse. ω_k ist die gewöhnliche Phononendispersion

$$\omega_k = \frac{2 c_s}{\tilde{a}} \left| \sin \frac{k \tilde{a}}{2} \right| \qquad \text{III.11b}$$

mit der longitudinalen Schallgeschwindigkeit $c_s = (\tilde{K}/M)^{1/2} \tilde{a}$. Fouriertransformation von $g(\zeta)$ gemäß

$$g(x,t) = \int dq \, e^{iq(x-vt)} \, g_q \qquad \text{III.12}$$

führt zusammen mit III.11 auf die Form

$$\hat{H}_{ww} = \frac{\hbar}{4} \frac{2\Pi}{L} \sum_{kk'q} W_{kk'}^{q} \, e^{-iqvt} \left(a_k + a_{-k}^{\dagger}\right)\left(a_{k'} + a_{-k'}^{\dagger}\right) \qquad \text{III.13}$$

Die Matrixelemente $W_{kk'}^{q}$ sind gegeben durch

$$W_{kk'}^{q} = -\Gamma g_q \left(\omega_k \omega_{k'}\right)^{1/2} \operatorname{sign} k \operatorname{sign} k' \, e^{\frac{i(k+k')}{2}} \Delta(k+k'+q) \qquad \text{III.14}$$

und verschwinden, wenn nicht k+k'+q einem reziproken Gittervektor entspricht. g_q ist durch

$$g_q = \frac{2\tilde{a}}{D\Pi} \frac{Q}{\sinh Q} \qquad \text{III.15}$$

mit $Q = \frac{D\Pi q \tilde{a}}{2}$ gegeben. Wie bei den Formfaktoren für die Neutronenstreuung geht die charakteristische Breite D des Solitons ein. Der exponentielle Abfall für große Wellenzahlen ist eine Konsequenz

der räumlich geringen Änderung der Verzerrung und zeigt, daß Umklapp-Prozesse vernachlässigt werden können. Aus III.12 ergibt sich deshalb

$$\hat{H}_{ww} = \frac{\hbar}{4}\frac{2\Pi}{L}\sum_{kk'} W^{q}_{kk'} e^{i(k+k')vt}(a_k + a^{\dagger}_{-k})(a_{k'} + a^{\dagger}_{-k'}) \qquad \text{III.16}$$

wobei der obere Index des Matrixelementes $q = -(k+k')$ im weiteren weggelassen wird.

Die Störung des Phonensystems III.16 enthält einen zeitunabhängigen Beitrag für $k = -k'$. Dieser Anteil kann exakt im Phononenspektrum berücksichtigt werden und führt zu einer Renormierung der Phononenenergien. In niedrigster Ordnung ist diese Renormierung gegeben durch

$$\tilde{\omega}_k = \omega_k (1 + \alpha) \qquad \text{III.17a}$$

α ist proportional zu g_o, wobei g_o die gesamte Verzerrung der Kette durch das Soliton representiert. Man findet mit III.5

$$\alpha = \frac{\Gamma}{ND} \qquad \text{III.17b}$$

Diese Korrektur ist von der Ordnung N^{-1} und verschwindet für ein einzelnes Soliton im thermodynamischen Limes. Tatsächlich liegt jedoch ein Gas von Solitonen vor. Im Rahmen der Vorstellung eines idealen Gases folgt für die Renormierung die Größenordnung 10^{-3} bis 10^{-4}. Dies ist zwar ein kleiner Effekt, da er aber direkt an die Variation eines äußeren Parameters gekoppelt ist (Magnetfeld im Falle von $CsNiF_3$ und TMMC), sollte er mit sehr genauen Meßmethoden wie z.B. Ultraschallpropagation meßbar sein. Der Solitonenbeitrag hängt dabei wie bei anderen Experimenten über die Breite D und die thermische Dichte (und damit die Energie der Anregungen) in charakteristischer Weise von Magnetfeld und Temperatur ab.

Der verbleibende Teil von $\tilde{H}_{ww}$ mit $k \neq -k'$ stellt eine zeitabhängige Störung des Phononensystems dar. Der wesentliche Unterschied zur Magnon-Soliton-Wechselwirkung besteht darin, daß $\tilde{H}_{ww}$ die Lorentz-Invarianz des elastischen Hamiltonian bricht. Die explizite Zeitabhängigkeit kann daher nicht eliminiert werden. Der nichtdiagonale Anteil der Störung beschreibt damit die Streuung von Phononen durch das Soliton und ergibt eine endliche Lebensdauer für die Phononen. Die einfache Gestalt der Zeitabhängigkeit

$$\tilde{H}_{ww} = \sum_{(q\neq 0)} A_q \, e^{i\Omega_q t} \quad , \; q = k-k' \; , \; \Omega_q = qv \; , \qquad \text{III.18}$$

erlaubt eine Behandlung des Energieaustausches zwischen Phononen und Soliton analog der Ramanstreuung. Wie bei der gewöhnlichen Ramanstreuung sind die Stokes-Komponenten, die Übergängen im Phononensystem mit Energieabsorption entsprechen, intensiver als die Anti-Stokes-Komponenten, die mit einer entsprechenden Energieemission verbunden sind. Aus diesem Grund erfolgt ein effektiver Energietransfer von dem bewegten Soliton in das Phononensystem. Deshalb wird die Solitonenbewegung gedämpft. Die Änderung der Gesamtenergie der Phononen wird durch den Ausdruck

$$\dot{E}_{ph} = \sum_{kk'}{}' \; \Omega_{k-k'} \, \nu_{kk'} \qquad \text{III.19}$$

beschrieben, wobei $\sum'$ kennzeichnet, daß nur über nichtdiagonale Elemente zu summieren ist. $\nu_{kk'}$ bezeichnet die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen zwei Phononenzuständen mit Wellenzahl k bzw. k', wobei der Übergang mit der Emission bzw. der Absorption eines Energiequantes $\hbar\Omega_{k-k'}$ verbunden ist. Solange die Störung klein ist, wenn also $\Gamma << \tilde{K}$ gilt, kann die Übergangswahrscheinlichkeit mittels Fermi's Goldener Regel bestimmt werden. Darüber-

hinaus ist die tatsächliche Verteilung der Phononen dann in guter Näherung durch die Gleichgewichtsverteilung gegeben. Insgesamt ist damit die Behandlung äquivalent zur Beschreibung der linearen Antwort des Phononensystems auf die Störung durch das Soliton.

Für das Soliton bedeutet die Energiezunahme im Phononensystem eine entsprechende Abnahme seiner kinetischen Energie. Wie die Bewegung von Versetzungen in Ferromagneten auf Grund der magnetoelastischen Wechselwirkung gedämpft ist (Babkin und Kravchenko 1971, Bar'yakhtar und Druinskiĭ 1977), so erfährt auch das Soliton als Folge der Spin-Gitter-Wechselwirkung eine Reibungskraft.

$$F = -\frac{\dot{E}_{ph}}{v} \qquad \text{III.20}$$

III 4 Dynamische Dämpfung der Solitonenbewegung

Die Energieänderung der Phononen besteht aus zwei Beiträgen

$$\dot{E}_{ph} = w_1 + w_2 ,$$

die auf unterschiedliche Wechselwirkungsprozesse mit voneinander unabhängigen Übergangswahrscheinlichkeiten zurückgehen.

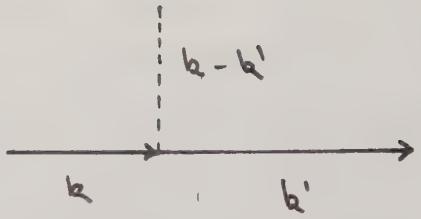
i) Phononen-Streuung

Der erste Beitrag ist durch

$$w_1 = \frac{\pi\Pi}{4} \iint dk\, dk' \, |W_{k,-k'}|^2 \, (\omega_k - \omega_{k'})(f_{k'} - f_k)\, \delta(\omega_k - \omega_{k'} - (k-k')v) \qquad \text{III.21}$$

gegeben, wobei sich die Integrale über die erste Brillouinzone erstrecken und f_k die Gleichgewichts-Boseverteilung bezeichnet. Dieser Beitrag folgt aus der inelastischen Streuung thermischer

Phononen.



(Die durchgezogenen Linien in der Skizze symbolisieren die Phononen.) Deshalb wächst w_1 mit steigender Temperatur und verschwindet bei T = O. Die δ-Funktion drückt die Energieerhaltung bei der Streuung unter Berücksichtigung der Dopplerverschiebung aus. Das hat zur Konsequenz, daß sich für das statische Soliton die Energie des Phononensystems nicht ändert. Fig. III.1 zeigt den Betrag der Reibungskraft auf das Soliton bei einer Solitonenbreite von zehn Gitterkonstanten und einer Temperatur von einem Zehntel der Debye-Temperatur θ_D als Funktion des Verhältnisses von Solitonengeschwindigkeit v zu Schallgeschwindigkeit c_s. Typische Größenordnungen für Gitterkonstante ($\tilde{a} = 3 \cdot 10^{-8}$ cm) und longitudinale Schallgeschwindigkeit ($c_s = 10^5$ cm s^{-1}) sind dabei zugrunde gelegt. Wesentliches Resultat ist, daß man für kleine Solitonengeschwindigkeiten ($\frac{v}{c_s} << \frac{T}{\theta_D}$) eine geschwindigkeitsunabhängige Viskosität

$$\eta = \frac{F}{v} \qquad \text{III.22}$$

definieren kann. Daraus ergibt sich ein Beitrag zur Mobilität des Solitons. Dieser Beitrag hängt nicht wesentlich von der Dispersion der Phononen ab, was ein Vergleich mit der Auswertung im Rahmen der Debye-Näherung (gestrichelte Kurve in Fig. III.1) zeigt. Die Debye-Näherung liefert bei tiefen Temperaturen und kleinen Geschwindigkeiten (d.h. $\frac{v}{c_s} << \frac{T}{\theta_D} << 1$) eine adäquate Beschreibung. Dieser Temperatur- und Geschwindigkeitsbereich umfaßt bereits die für die nichtlinearen Anregungen relevanten

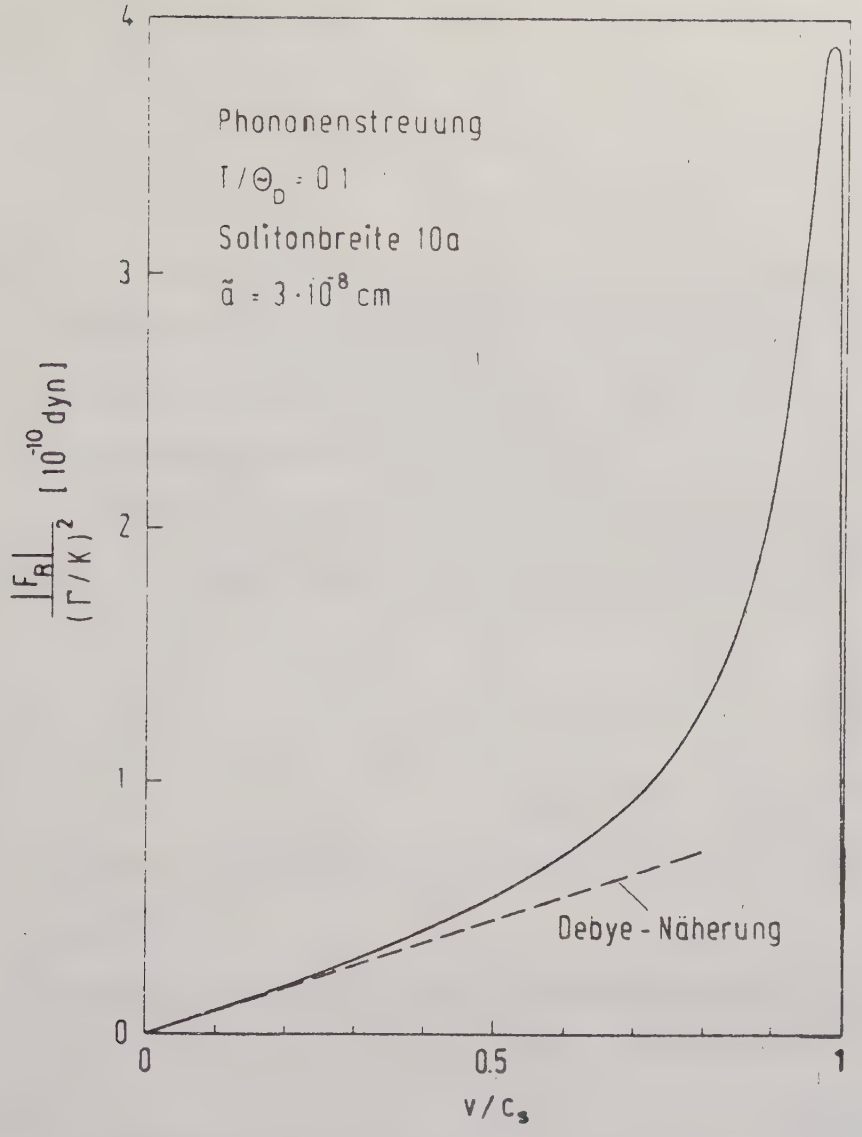


Fig. III.1 Reibungskraft auf ein Soliton mit einer Breite von zehn Gitterkonstanten als Funktion des Verhältnisses von Solitonengeschwindigkeit v zu Schallgeschwindigkeit $c_s = 10^5$ cm s^{-1} als Folge der Phononenstreuung bei einer Temperatur von einem Zehntel der Debye-Temperatur. Gezeigt ist auch das entsprechende Ergebnis in Debye-Näherung (gestrichelte Kurve).

Größenordnungen (siehe Kapitel I 3).

Mit wachsender Solitonengeschwindigkeit werden immer mehr Zustände über den nahezu linearen Bereich der Dispersion hinaus an der Streuung beteiligt, und die Viskosität wird geschwindigkeitsabhängig. Daß dies kein Effekt des eindimensionalen Charakters der Phononen ist, sondern allein auf die Dispersion zurückgeht, zeigt sich an der für die Streuung relevanten modifizierten Dispersion (vgl. δ-Funktion in Gl. III 21):

$$\omega_k^* = \omega_k - v\,k \qquad \text{III.23}$$

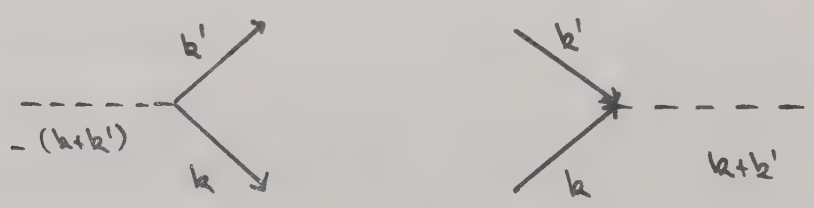
Solange nämlich die Solitonengeschwindigkeit nicht in der Größenordnung der Schallgeschwindigkeit liegt, liegt die Singularität in der zu Gl. III.23 gehörenden Zustandsdichte nicht im Zentrum der Brillouinzone und spielt wegen des exponentiellen Abfalls des Matrixelementes bei großen k-Werten keine Rolle.

ii) Čerenkov -Effekt

Der zweite Beitrag zu $\dot{E}_{ph}$ ist durch

$$w_2 = \frac{\pi\Pi}{16} \iint dk\,dk' \;|W_{k,k'}|^2\,(\omega_k + \omega_{k'})\,(1 + f_k + f_{k'})\,\delta(\omega_k+\omega_{k'}-(k+k')v) \qquad \text{III.24}$$

gegeben. Dieser Beitrag zur Dämpfung folgt aus der gleichzeitigen Emission bzw. Absorption zweier Phononen:



Diese Prozesse stehen in Analogie zur Čerenkov-Strahlung und liefern auch bei T = 0 einen Beitrag zur Dämpfung der Solitonenbewegung. Čerenkov-Strahlung tritt jedoch nur bei Teilchen auf, deren Geschwindigkeit die Phasengeschwindigkeit der emittierten Quanten übersteigt. Der Effekt hängt daher von der Phononendispersion ab und w_2 verschwindet, solange v nicht größer als die minimale Phasengeschwindigkeit der Phononen ist. Im Rahmen des 1D Modells ist das gerade die Phasengeschwindigkeit der Phononen am Rand der Brillouinzone und aus III.11b ergibt sich eine minimale Geschwindigkeit

$$v_{min} = \frac{2}{\pi} c_s \qquad \text{III.25}$$

Wegen der bereits mehrfach angesprochenen exponentiell kleinen Kopplung von Phononen am Rand der Brillouinzone an das Soliton wächst der Čerenkov-Effekt exponentiell mit $v-v_{min}$ an. Dieses Verhalten sieht man an Fig. III.2 in der der Logarithmus der Energieänderung des Phononensystems gegen v/c_s

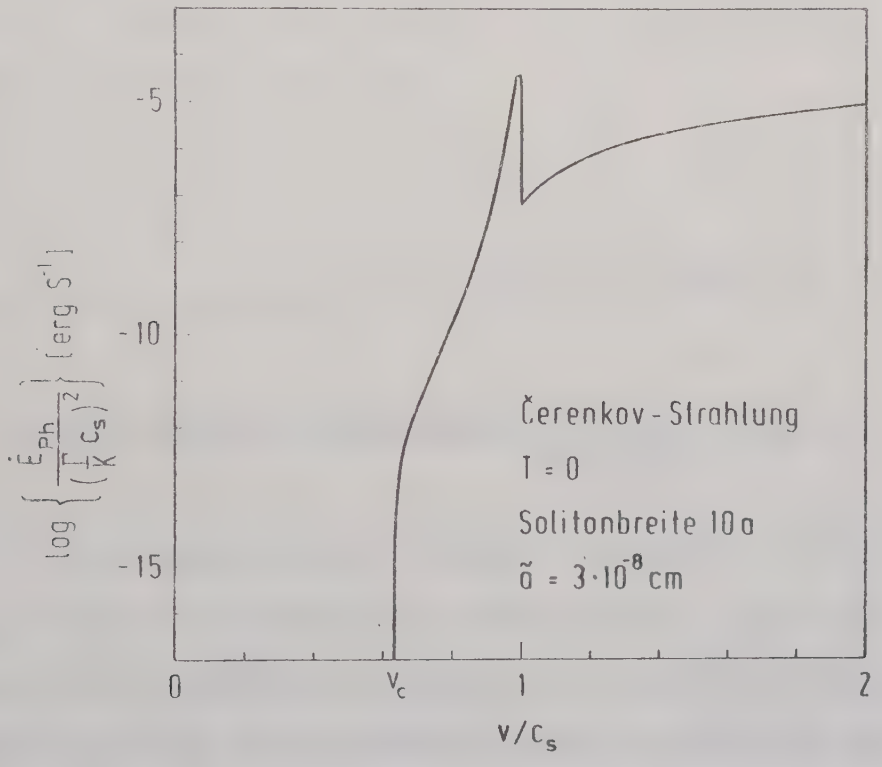


Fig. III.2 **Logarithmus der Energieänderung des Phononensytems als Funktion des Verhältnisses von Solitonengeschwindigkeit v zu Schallgeschwindigkeit $c_s = 10^5$ cm s^{-1} als Folge des Čerenkov-Effektes bei T = 0.**

Wie im Falle der inelastischen Phononenstreuung ist erst die ausgeprägte Spitze bei hohen Geschwindigkeiten $v \lesssim c_s$ ein Artifakt der Annahme einer 1D Phononendispersion.

Ein Vergleich mit den Ergebnissen von SJ (Fig. III.3 und Fig. III.4) zeigt, daß schon die phänomenologische Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Phononen und Solitonen gemäß Gl. III.7c

ausreicht, die resultierende dynamische Dämpfung der Solitonenbewegung qualitativ richtig zu beschreiben. Wie an dem Matrixelement $W_{kk'}$ (Gl. III.14) abzulesen ist, nimmt die Intensität der beiden Streuprozesse i) und ii) mit abnehmender Solitonen-

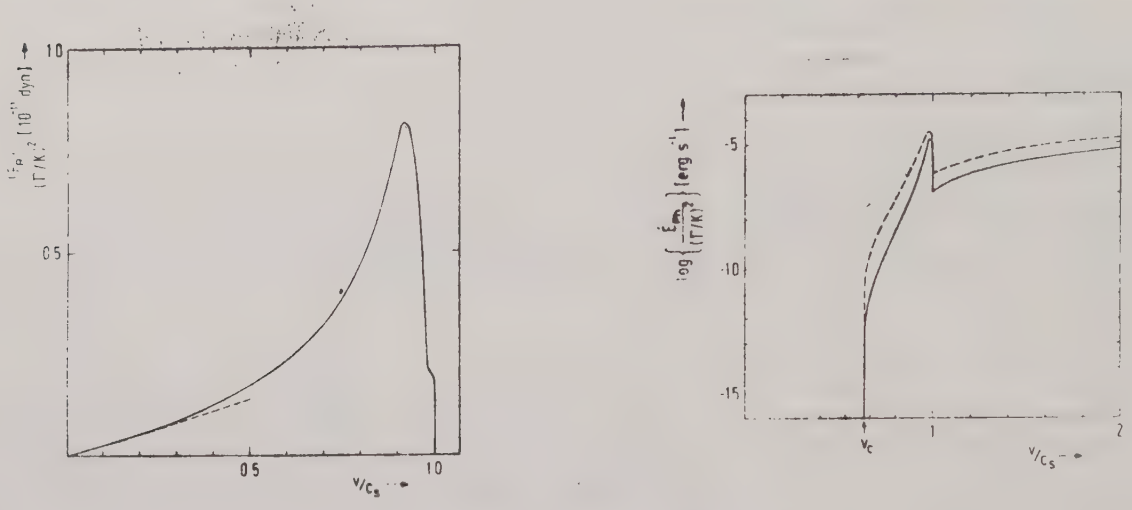


Fig. III.3 Zu Fig. III.1 entsprechende Figur aus Schöbinger und Jelitto (1981).

Fig. III.4 Zu Fig. III.2 entsprechende Figur aus Schöbinger und Jelitto (1981).

breite zu. In Hinblick auf die in Kapitel I 4 angesprochenen Anwendungen bei Blochwänden ist das sehr interessant, da dabei sehr schmale Solitonen diskutiert wurden. In Gegensatz zum Einfluß der diskreten Natur des Gitters in Form eines Peierls-Potentials (siehe Kapitel I 4) ist jedoch die Spin-Phonon-Kopplung durchaus nicht nur auf den Fall extrem schmaler Solitonen beschränkt. In ähnlicher Weise ist der Čerenkov-Effekt auch nicht mit der Eilenberger (1973) diskutierten "Bremsstrahlung" zu verwechseln, die als Folge der Beschleunigung des Solitons in einem äußeren Potential auftritt und beispielsweise in den numerischen Simulationen von Currie et al (1977) zu beobachten ist (siehe Kapitel I 4).

Zum Abschluß dieses Kapitels sei darauf hingewiesen, daß Messungen der Ferromagnetischen Resonanz (FMR) unter Umständen geeignet sind, Dämpfungseffekte für Solitonen nachzuweisen. Darauf haben Wojtczak und Sukiennicki (1982) hingewiesen. Nach diesen Autoren hängt die Absorption der rf Energie von der Solitonengeschwindigkeit ab und ist um einen Beitrag $\sim v^2$ bezüglich der Frequenz der Mode $k = 0$ verschoben. Bisher vorliegende Messungen zur FMR (Rosinski und Elschner 1977) haben diesen Aspekt allerdings noch nicht untersucht.

III 5 Zusammenfassung

Prinzipiell ist die Beschreibung solitärer Wellen in magnetischen Systemen mit der Kopplung an die elastischen Freiheitsdes Gitters verträglich, solange die Breite der Solitonen groß gegen die Gitterkonstante und die Solitonengeschwindigkeit klein gegen die Schallgeschwindigkeit ist. Über die homogene Grundzustandsverzerrung hinaus sind dann Modifikationen der Solitonenform durch die magneto-elastische Kopplung von untergeordneter Bedeutung, da diese Kopplung im allgemeinen klein ist. Aus der nichtlinearen Spin-Gitter-Wechselwirkung resultiert jedoch eine mit abnehmender Solitonenbreite zunehmende Wechselwirkung zwischen Solitonen und Phononen, deren explizit zeitabhängiger Anteil zu einer dynamischen Dämpfung der Solitonenbewegung führt. Der zeitunabhängige Anteil ergibt die bereits erwähnte Renormierung der Phononenenergien, die der eingangs erwähnten Abnahme der elastischen Konstanten als Folge magnetischer Korrelationen entspricht.

Obwohl wie im Falle der Magnonen die diskrete Natur des Modells bei der Streuung eine gewisse Rolle spielt, ist die Dämpfung doch im wesentlichen durch eine viskose Reibungskraft beschreibbar. Möglicherweise ist diese Reibung durch FMR Messungen nachweisbar.

Die Streuung der Phononen an Solitonen liefert schließlich als zur Dämpfung der Solitonenbewegung komplementären Effekt einen Beitrag zur thermischen Leitfähigkeit. Die Magnetfeldabhängigkeit der entsprechenden experimentellen Resultate für den Fall von TMMC (Buijs und de Jonge 1982) ist durchaus in Einklang mit den Erwartungen für einen Solitonenbeitrag. Eine befriedigende Auswertung der thermischen Leitfähigkeit durch Streuung der Phononen an Solitonen im Rahmen der entsprechenden Boltzmann-Gleichung steht allerdings noch aus.

Die neuesten Ergebnisse zu den elastischen Konstanten von $CsNiF_3$ (Käräjämäki et al 1982, Ganot et al 1982) ergeben noch keinen Hinweis auf eine magneto-elastische Kopplung in dieser Substanz. Möglicherweise erhält man weiteren Aufschluß aus genaueren Messungen der thermischen Ausdehnung, Bestimmung der elastischen Konstanten als Funktion des Magnetfeldes bzw. Messung der Ultraschallabsorption , womit die magneto-elastische Wechselwirkung beispielsweise in dem 1D Antiferromagneten $CsNiCl_3$ nachweisbar ist. Da in den genannten neueren Experimenten eine Abhängigkeit der Ergebnisse von der verwendeten Probe bzw. der experimentellen Meßmethode weitgehend ausgeschlossen ist, ist allerdings ein so deutlicher Effekt, wie er vor einiger Zeit bei der Bestimmung des Youngschen Moduls parallel zu den Spinketten in $CsNiF_3$ beobachtet wurde (Barmatz et al 1977), in Zusammenhang mit der magneto-elastischen Wechselwirkung auszuschließen.

IV Topologische Instabilität von Kinks in eindimensionalen Spinketten

In neueren Experimenten ist der Einfluß von Verunreinigungen auf die dynamischen Eigenschaften von TMMC untersucht worden (Boucher et al 1982, Benner et al 1983). Dabei wird ein gewisser Prozentsatz von Mn^{2+}-Ionen durch unmagnetische Cd^{2+}- bzw. magnetische Cu^{2+}-Ionen ersetzt, wobei die Austauschkopplung zwischen Cu^{2+}- und Mn^{2+}- Ionen sehr viel kleiner als die zwischen den Mn^{2+}-Ionen ist. Das Modell eines idealen Solitonen-Gases versagt in diesem Fall bei der Erklärung des Solitonenbeitrages zum dynamischen Strukturfaktor. Vielmehr scheint die mittlere Weglänge kleiner als der mittlere Abstand zwischen den Solitonen zu sein, so daß Dämpfungseffekte wichtig werden. Mehrfach angesprochen wurde bereits, daß solche Effekte in realen Systemen immer zu erwarten sind. Durch die Messungen bei verschiedener Dotierung scheint damit die Möglichkeit gegeben zu sein, die Auswirkung einer Dämpfung der Solitonenbewegung quantitativ zu untersuchen. Auch in $CsNiF_3$ ist eine Dotierung mit Verunreinigungen möglich (Steiner und Axmann 1976, Steiner und Berthet 1977), wenngleich der Aspekt der Solitonendynamik in diesem Fall noch nicht untersucht wurde.

Der Einfluß von Verunreinigungen auf den Solitonenbeitrag zum dynamischen Strukturfaktor ist bisher nur unter der Annahme einer phänomenologischen Dämpfung der Solitonenbewegung behandelt worden (Maki 1981b). Dabei liegt die Vorstellung zugrunde, daß die Verunreinigungen lokalisierte Potentiale darstellen, an denen die Solitonen inelastisch gestreut werden, aufgrund des topologischen Erhaltungssatzes jedoch nicht in andere Anregungen zerfallen kön-

nen. Analog der Bewegung eines Teilchens unter dem Einfluß von Zufallskräften ("Brownsche Bewegung") ergibt sich die Dämpfung in diesem Fall aus den von Zeit zu Zeit auftretenden Geschwindigkeitsänderungen. Es ist daher sinnvoll, die mikroskopische Dynamik von Solitonen zu untersuchen, um zum einen eine Verbindung zwischen der phänomenologischen Dämpfungskonstante und den entsprechenden Modellparametern herzustellen, zum anderen aber, um die Annahmen der phänomenologischen Beschreibung zu überprüfen. Speziell der zweite Punkt ist in 1D magnetischen Systemen von besonderem Interesse, da die Kopplung zwischen dem Spin der Verunreinigung und dem der Wirtssubstanz im allgemeinen sehr viel kleiner als die Kopplung zwischen den Spins der Wirtssubstanz ist. Eine unmagnetische Verunreinigung unterbricht schließlich sogar die Kette.

Für die Interpretation der Ergebnisse in $CsNiF_3$ sind nach Abschnitt II die Solitonen mit $\theta_m << \Pi$ wichtig. Trotz im allgemeinen deutlicher Abweichungen des Solitonen-Bandes von den Resultaten der SG-Beschreibung sind jedoch gerade diese Anregungen weitgehend planar und den SG-Solitonen sehr ähnlich, sieht man von deren gegenseitiger Wechselwirkung ab. Hinzu kommt, daß für die im Bereich der Verunreinigung auftretenden Änderungen der Winkeldifferenzen zwischen benachbarten Spins allein das Verhältnis von Austausch- zu Zeeman-Energie maßgebend ist (vgl. Kapitel I 2.1). Es ist daher sinnvoll, sich zunächst einmal im reinen System auf die SG-Beschreibung zu beschränken, in die die Anisotropie nicht mehr explizi eingeht. Nach Abschnitt II ist zudem bei relevanten Magnetfeldern die Energiebarriere für den topologischen Zerfall der planaren Anregungen so groß, daß bei tiefen Temperaturen der topologische Erhaltungssatz selbst für den Fall endlicher Anisotropie eine

akzeptable Näherung für die hier interessierende Problemstellung darstellt. Weniger einschneidend als im Falle des planaren Ferromagneten sind die Näherungen, mit denen die Hamiltonfunktion von TMMC auf die SG-Theorie abgebildet wird. Auch dieser Antiferromagnet läßt sich auf eine effektive Hamiltonfunktion in einer Form wie für den planaren Ferromagneten transformieren (Kapitel I 3). Es ist jedoch zu beachten, daß die entsprechende SG-Gleichung im Gegensatz zum Fall von $CsNiF_3$ II-Domänenwände beschreibt.

In diesem Abschnitt wird gezeigt (Schöbinger 1983), daß SG-Solitonen in einem endlichen ausgedehnten 1D planaren Ferromagneten an einer Verunreinigung mit schwacher Kopplung topologisch instabil werden (d.h. die topologische Ladung ist keine Erhaltungsgröße mehr und einzelne Solitonen werden vernichtet), wenn das Magnetfeld eine kritische Stärke überschreitet. Darüberhinaus liefert das kritische Magnetfeld ein Kriterium dafür, ob die Verunreinigung effektiv wie eine Unterbrechung der Spinkette wirkt. So kann das Soliton über die Verunreinigung hinweg propagieren, wenn die Stärke des Magnetfeldes klein gegen den kritischen Wert ist. Das Soliton wird dagegen reflektiert, wenn das Magnetfeld groß gegen das kritische Feld ist. Der Fall der Reflektion ist ein exaktes Resultat für das halbunendliche SG-System (Perring und Skyrme 1962). Die Magnetfeldabhängigkeit hat ihren Ursprung allein in der entsprechenden Abhängigkeit der Breite des Solitons vom Magnetfeld. Die Ergebnisse dieses Abschnittes hängen damit in charakteristischer Weise von dem Verhältnis von Austausch- zu Zeemanenergie ab. Wesentlich ist, daß sowohl die diskrete Natur der Verunreinigung berücksichtigt, als auch eine beliebig schwache Kopplung zwischen dem Spin der Verunreinigung und dem der Wirtssubstanz zugelassen wird. Mit abnehmender Kopplung nimmt auch das

kritische Magnetfeld ab, d.h. die minimale Solitonen-Breite, bei der die Instabilität jeweils auftritt, nimmt zu. Das ist besonders deshalb interessant, weil der experimentelle Variationsbereich für das Magnetfeld im allgemeinen beschränkt ist und damit auch die Solitonen-Breite nicht beliebig klein gemacht werden kann. Zudem ist in den meisten Fällen die Kopplung an die Verunreinigung sehr klein.
Die Ergebnisse werden durch numerische Simulation bestätigt. Mit der Simulation wird auch die angesprochene phänomenologische Vorstellung von der Solitonen-Dynamik verglichen. Schließlich werden die zur Übertragung der Ergebnisse auf Π-Domänenwände notwendigen Modifikationen diskutiert und erste numerische Simulationen zu diesem Fall werden vorgestellt.

IV 1 Das Modell

Läßt man zunächst einmal dynamische Effekte unberücksichtigt, so hängt die Hamiltonfunktion in sphärischen Polarkoordinaten (Kapitel II 1.2, Fig. II.1) nur vom Azimutwinkel φ_n ab:

$$H = \sum_n J S^2 \eta_{n+1,n}(1 - \cos(\varphi_n - \varphi_{n+1})) + g\mu_B BS(1 - \cos\varphi_n). \quad \text{IV.1a}$$

Dabei ist in IV.1a die Grundzustandsenergie bereits abgezogen. Mit der Bezeichnung $\tilde{J} = JS^2$ für die Kopplung zwischen den Wirtsspins sowie J' für die entsprechende Kopplung an den Spin der Verunreinigung ergibt sich für eine Verunreinigung am Gitterplatz n_o

$$\eta_{n+1,n} = 1 + \varepsilon(\delta_{n,n_o} + \delta_{n+1,n_o}) \quad \text{IV.1b}$$

mit $\varepsilon = J'/\mathfrak{J} - 1$. Die weiteren Betrachtungen werden auf den Fall schwacher Kopplung beschränkt. ε variiert dann von -1 bis 0. $\varepsilon = -1$ entspricht einer Unterbrechung der Kette, $\varepsilon = 0$ repräsentiert hingegen das reine, unendliche System.

In diesem Abschnitt ist es zweckmäßig, die Gitterkonstante a als Längeneinheit zu verwenden und als Energieeinheit die Größe $\tilde{E}^* = g\mu_B BD$ mit $D = (\mathfrak{J}/g\mu_B B)^{1/2}$ zu wählen. Ein Vergleich mit der Notation von Abschnitt II führt auf den Zusammenhang $\tilde{E}^* = E^* b^{1/2}$ bzw $D = \frac{\delta_o}{a} b^{-1/2}$ und zeigt, daß 2 D gerade die charakteristische Ausdehnung des statischen Solitons in Einheiten der Gitterkonstante ist. In diesen Einheiten hat der Hamiltonian die Gestalt

$$H = \frac{1}{D} \sum_n D^2 \eta_{n+1,n} (1 - \cos(\varphi_n - \varphi_{n+1})) + (1 - \cos \varphi_n) \qquad \text{IV.2}$$

und hängt nur noch über ε und D von den Modellparametern ab. Vorausgesetzt, daß $\varepsilon = 0$ und $D >> 1$, ist die Kontinuumsnäherung gerechtfertigt. Mit dem Übergang $n \to z = D\tilde{z}$, $D(\varphi_{n+1} - \varphi_n) \to \frac{\partial \varphi}{\partial \tilde{z}}$, $\frac{1}{D} \sum_n \to \int d\tilde{z}$ ergibt sich aus IV.2 der statische Anteil der gewöhnlichen SG-Hamiltonfunktion:

$$\int d\tilde{z} \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \tilde{z}} \right)^2 + (1 - \cos \varphi) \right\} \qquad \text{IV.3}$$

In den oben eingeführten Einheiten ist die Energie des statischen SG-Solitons durch $\tilde{E}_o = 8$ gegeben. Infolge der bereits mehrfach angesprochenen Konkurrenz zwischen Austausch- und Zeeman-Energie erwartet man zunehmende Winkeldifferenzen zwischen dem Spin der Verunreinigung und seinen nächsten Nachbarn, wenn die Kopplung an die Verunreinigung und damit ε abnimmt. Obwohl angenommen wird, daß die Solitonenbreite im ungestörten Bereich viel größer als die Gitterkonstante ist ($D >> 1$), muß daher die diskrete Form der Hamiltonfunktion zumindest in der unmittelbaren Umgebung der Ver-

unreinigung verwendet werden. Nur in dieser diskreten Form kann eine beliebige Abnahme von ε behandelt werden. Zudem ist der Übergang zu einer Kettenunterbrechung $\varepsilon \to -1$ im Rahmen einer Kontinuumstheorie nicht beschreibbar. Schließlich ist auch die Periodizität des Austauschterms bezüglich $\varphi_n - \varphi_{n+1}$ für große Winkeldifferenzen zu berücksichtigen.

Bisher vorliegende Ergebnisse für den Fall von Blochwänden in Systemen mit Bereichen unterschiedlicher Austauschkopplung sind im wesentlichen auf die Kontinuumsbeschreibung beschränkt. So wurden beispielsweise Systeme aus dünnen magnetischen Filmen, die über die Austauschwechselwirkung gekoppelt sind, untersucht (Goto et al 1965, Hagedorn 1970). Eine verwandte Situation liegt aber auch in einem unendlichen magnetischen System vor, wenn die Austauschkopplung im Bereich einer Strukturgrenze ("grain boundary") geringer als im idealen Kristall ist. Schon die Kontinuumstheorie zeigt, daß aus einem solchen Defekt ein lokalisiertes Potential für Kinks resultiert (vgl. Peierls-Potential im Falle sehr schmaler Kinks; Kapitel I 3). Für kleine Störungen wurde aus diesem Potential die entsprechende Koerzitivkraft bestimmt (Friedberg und Paul 1975). Die Formulierung des Problems im Rahmen der SG-Theorie (Paul 1978; vgl. Kapitel I.3) liefert analoge Resultate. Aus den eingangs erwähnten Gründen ist jedoch die Erweiterung der Kontinuumsresultate auf den Fall beliebiger Kopplung (Paul 1982) für die Untersuchung der Hamiltonfunktion IV.2 ohne Bedeutung.

Für diskrete Systeme gibt es nur wenige Resultate, die überdies auf den Fall kleiner Kopplung beschränkt sind. So haben Craik und Hill (1974) sowie Hilzinger (1977) das aus dem oben angesprochenen Defekt resultierende lokalisierte Potential für eine ebene Blochwand aus der numerisch bestimmten Wandkonfiguration berechnet.

Wie bei sehr schmalen Blochwänden (Kapitel I 4) wird dabei eine endliche Anzahl von Spins im Bereich der Verunreinigung diskret behandelt. Nicht berücksichtigt ist allerdings der Fall verschwindender Kopplung.

Die Stabilität von Blochwänden im gestörten System ist lediglich im Fall der dünnen magnetischen Filme untersucht worden. Diskutiert wurde allerdings nur die Stabilität der Konfiguration gegen kleine Änderungen des Magnetfeldes (Hagedorn 1970). Diese spezielle "feldinduzierte Instabilität" ist aber in jedem Fall eine obere Schranke für den Stabilitätsbereich. An dieser Stelle sei auf eine vergleichbare Stabilitätsanalyse von van den Broek und Zijlstra (1971) bei sehr schmalen Blochwänden in einem reinen System hingewiesen. Es zeigt sich nämlich in diesem Zusammenhang, daß das kritische Feld wesentlich davon abhängt, ob die diskrete Natur der Spins berücksichtigt ist oder nicht.

Die bereits angesprochene SG-Beschreibung wurde schließlich auch zur Beschreibung der Dynamik von Blochwänden in Anwesenheit von ebenen Defekten verwendet (Paul 1979). Die Anwendung der von Fogel et al (1977) für das gestörte SG-Modell entwickelten Störungstheorie schränkt die Ergebnisse wiederum auf die Kontinuumstheorie ein. Die Vorstellung von der Bewegung des ungestörten Solitons in dem durch die Verunreinigung hervorgerufenen Potential (vgl. auch die Bewegung im Peierls-Potential; Kapitel I 4) ist darüberhinaus nur für kleine Störungen gültig. In der von Paul verwendeten Näherung gibt es keine inelastische Streuung von Solitonen an dem Defekt. Für beliebige Störungen ist die numerische Simulation der Dynamik wieder ein gutes Hilfsmittel. Schon die Beispiele der Simulation diskreter elastischer Systeme (Yoshida et al 1976, Nakamura und Takeno 1977, Yajima 1977, Yoshida und Sakuma 1977, Nakamura

1978, Yoshida und Sakuma 1978) zeigen, daß sich die analytischen Näherungen zur Beschreibung der Dynamik letztlich erst aus dem Vergleich mit den numerischen Ergebnissen rechtfertigen. Die Ergebnisse für diese Systeme können allerdings nicht ohne weiteres auf den Fall der Hamiltonfunktion IV.2 übertragen werden, da die entsprechenden Solitonen vom Toda- bzw. Korteweg-de Vries-Typ sind. Diese nichtlinearen Lösungen weisen keinen Erhaltungssatz für eine topologische Ladung auf.

Nach den Ergebnissen für halbunendliche Systeme (Perring und Skyrme 1962) werden SG-Solitonen an einer Kettenunterbrechung in Form eines Antisolitons reflektiert. Entsprechend findet am Kettenende eine φ-Drehung um 4π statt. Als Folge der erwähnten Periodizität des Austauschterms ist eine solche Drehung und damit eine Reflexion des Solitons auch möglich, wenn eine Kopplung an den Spin der Verunreinigung besteht. Für eine sehr schwach gekoppelte Verunreinigung sollte sich damit die Solitonendynamik auch in Form einer inelastischen Reflexion am freien Ende mit Störung auffassen lassen. Ohne die Periodizität des Austauschterms kann ein topologisches Soliton selbst bei infinitesimaler Kopplung allenfalls an der Verunreinigung lokalisiert, nicht jedoch reflektiert werden. Es sei noch einmal betont, daß die im Fall der Toda-Solitonen beobachtete Reflexion an einer Verunreinigung mit schwacher Kopplung (Nakamura und Takeno 1977, Nakamura 1978) einen völlig anderen physikalischen Ursprung als im Falle topologischer Solitonen hat.

Am Beispiel einer Spinkette mit Verunreinigung wird somit ein weiterer substantieller Unterschied zwischen dem magnetischen System und dem SG- bzw. dem entsprechenden mechanischen Analog-Modell (Kapitel I 1) deutlich. Neben der dreidimensionalen Natur des Spinraums ist die Periodizität des Austauschterms eine weitere Ursache

dafür, daß im strengen Sinne kein topologischer Erhaltungssatz gilt. Vorweggenommen sei schon an dieser Stelle, daß sich diese Tatsache im reinen System für D > 1 nicht auswirkt.

IV 2 Das statische Problem

IV 2.1 Das statische Soliton

Aus der Minimalisierung von H bezüglich der Winkel φ_n ergibt sich die statische Gleichgewichtskonfiguration für die Spins. Die resultierenden Differenzengleichungen

$$F_n(\varphi_{n-1},\varphi_{n+1};\varphi_n) \equiv -D^2\{\eta_{n+1,n}\sin(\varphi_{n+1}-\varphi_n) - \eta_{n,n-1}\sin(\varphi_n-\varphi_{n-1})\}+\sin\varphi_n = 0 \qquad \text{IV.4}$$

entsprechen der rechten Seite von II.2. Die Gleichungen IV.4 sind damit gleichbedeutend mit der Forderung, daß das auf den n-ten Spin wirkende Gesamtdrehmoment verschwinden soll. Neben den von der SG-Theorie bekannten, entarteten, konstanten Vakuumslösungen

$$\varphi_n = 2\Pi m \ , \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \qquad \text{IV.5}$$

gibt es als Folge der Periodizitätseigenschaft des Austauschterms in IV.2 noch eine weitere Klasse trivialer Lösungen mit verschwindender Energie

$$\varphi_n = 2\Pi m\,\theta(n-n^*) \ , \qquad \text{IV.6}$$

wobei $\theta(x)$ die "Heaviside"-Funktion und n^* ein beliebiger Gitterplatz ist. Die Ununterscheidbarkeit der Lösungen IV.5 und IV.6 verdeutlicht, daß der topologische Erhaltungssatz der SG-Theorie

nicht mehr mit der Hamiltonfunktion IV.2 verknüpft ist.

Bereits in Kapitel IV 1 wurde erwähnt, daß unter der hier verwendeten Voraussetzung $D >> 1$ eine Kontinuumsbeschreibung für das ungestörte System gerechtfertigt ist. Das statische SG-Soliton ist dann eine Lösung der der Hamiltonfunktion IV.3 entsprechenden statischen SG-Gleichung. Wegen der Nächst-Nachbar-Kopplung ist aber unabhängig von der Stärke der Verunreinigung die Kontinuumsbeschreibung in den ungestörten Bereichen $n < n_o-1$ und $n > n_o+1$ (im Folgenden als I und III bezeichnet) der Spinkette immer angemessen. Für Kinks mit den Randbedingungen

$$\lim_{n\to\pm\infty} \varphi_n = 0,\ 2\pi \qquad \text{IV.7}$$

ist deshalb ein Ansatz der Form

$$\varphi_n^K = \begin{cases} 4\tan^{-1}\exp(-(n-\Delta^I)/D) & \text{I: } n\leq n_o-1 \\ \varphi_{n_o} & \text{II: } n=n_o \\ 4\tan^{-1}\exp(-(n-\Delta^{III})/D) & \text{III: } n\geq n_o+1 \end{cases} \qquad \text{IV.8}$$

zu wählen. Δ^I und Δ^{III} erlauben eine starre Verschiebung der Flanken des Kinks. Zur Berechnung der Kink-Energie ist die Hamiltonfunktion IV.2 gemäß

$$H = H_I + H_{II} + H_{III} \qquad \text{IV.9a}$$

in die den drei Bereichen entsprechenden Anteile

$$H_I = \frac{1}{D}\sum_{n=-\infty}^{n_o-2}\{D^2(1-\cos(\varphi_n-\varphi_{n+1}))+\frac{1}{2}(2-\cos\varphi_n-\cos\varphi_{n+1})\} \qquad \text{IV.9b}$$

$$H_{II} = \frac{1}{D}\{D^2(\eta_{n_o-1,n_o}(1-\cos(\varphi_{n_o-1}-\varphi_{n_o}))+\eta_{n_o+1,n_o}(1-\cos(\varphi_{n_o}-\varphi_{n_o+1})))$$
$$+\frac{1}{2}(2-\cos\varphi_{n_o-1}-\cos\varphi_{n_o+1})+(1-\cos\varphi_{n_o})\} \qquad \text{IV.9c}$$

$$H_{III} = \frac{1}{D} \sum_{n=n_o+1}^{\infty} \{D^2(1 - \cos(\varphi_n - \varphi_{n+1})) + \frac{1}{2}(2 - \cos\varphi_n - \cos\varphi_{n+1})\}$$

IV.9d

zu zerlegen. Zu beachten ist dabei, daß die Zeeman-Energie der Randspins (φ_{n_o-1} bzw. φ_{n_o+1}) zwischen den angrenzenden Bereichen aufgeteilt ist, womit eine Doppelzählung dieser Energiebeiträge vermieden ist. Nach Einsetzen von IV.8 in die Ausdrücke IV.9 kann die Energie in den ungestörten Bereichen I und III durch Übergang zur Kontinuumsform IV.3 ausgewertet werden. Für den Bereich I folgt dann beispielsweise

$$H_I \to \int_{-\infty}^{\frac{(n_o-1)}{D}} d\tilde{z} \{\frac{1}{2}\left(\frac{\partial \varphi^K}{\partial \tilde{z}}\right)^2 + (1 - \cos\varphi^k)\} \equiv E_K^I \qquad \text{IV.10a}$$

und mit

$$\varphi^K = 4\tan^{-1}\exp(-(\tilde{z} - \frac{\Delta^I}{D})) \qquad \text{IV.10b}$$

lautet das Ergebnis

$$E_K^I = 4(1 + \tanh\frac{n_o - 1 - \Delta^I}{D}) \quad . \qquad \text{IV.10c}$$

Der Energieanteil E_K^I kann dann über IV.10b mit $\tilde{z} = \frac{n_o - 1}{D}$ auch als Funktion von $\varphi^K_{n_o-1}$ ausgedrückt werden:

$$E_K^I = 4(1 + \cos\frac{\varphi^K_{n_o-1}}{2}) \quad . \qquad \text{IV.10d}$$

Entsprechend ist E_K^{III} als Funktion von $\varphi^K_{n_o+1}$ berechenbar. Insgesamt erhält man damit für die Kink-Energie

$$E_K = 4(2 - \cos\frac{\varphi_{n_o+1}}{2} + \cos\frac{\varphi_{n_o-1}}{2}) + \frac{1}{2D}(2 - \cos\varphi_{n_o+1} - \cos\varphi_{n_o-1})$$
$$+ (1 - \cos\varphi_{n_o}) + \frac{1}{D}(D^2(1+\varepsilon)(2 - \cos(\varphi_{n_o-1} - \varphi_{n_o})$$
$$- \cos(\varphi_{n_o} - \varphi_{n_o+1}))) \quad . \qquad \text{IV.11}$$

Hier wie auch im folgenden ist bei den Winkeln der obere Index K

weggelassen.

Minimalisierung der Kink-Energie IV.11 reduziert nun das Differenzengleichungssystem IV.4 auf ein effektives Drei-Spin-Problem:

$$\tilde{F}_{n_o-1}(\varphi_{n_o};\varphi_{n_o-1}) = \tilde{F}_{n_o}(\varphi_{n_o-1},\varphi_{n_o+1};\varphi_{n_o}) = \tilde{F}_{n_o+1}(\varphi_{n_o};\varphi_{n_o+1})$$

$$= 0 \,, \qquad \text{IV.12}$$

wobei die $\tilde{F}_{n_i} = \frac{\partial E_K}{\partial \varphi_{n_i}}$ die effektiven Gesamt-Drehmomente für die Spins der Gitterplätze $n_i = n_o-1,\ n_o,\ n_o+1$ sind. Aus IV.12 lassen sich die Winkel φ_{n_o-1}, φ_{n_o}, φ_{n_o+1} und damit auch die Verschiebungen Δ^I und Δ^{III} als Funktion von ε und D bestimmen. Als Vorgriff auf die Stabilitätsanalyse in Kapitel IV 2.2 sei schon an dieser Stelle erwähnt, daß die dominante Instabilität mit der Konfiguration verknüpft ist, bei der maximale Winkeldifferenzen an der Verunreinigung auftreten. Das ist aber gerade die symmetrische Konfiguration mit $\varphi_{n_o} = \Pi$ und $\Delta^I - n_o = n_o - \Delta^{III}$. Nur am Beispiel dieser Konfiguration, die nur von einem Parameter abhängt, sei deshalb die Form der Lösungen von IV.12 diskutiert. Der freie Parameter (o.B.d.A Δ^I) wird in diesem Fall durch die Beziehung

$$\tanh\left(\frac{1+(\Delta^I-n_o)}{D}\right) = \frac{D}{D^2(1+\varepsilon)-\frac{1}{2}} \qquad \text{IV.13}$$

festgelegt. Das Ergebnis läßt sich in vier Punkten zusammenfassen:

i) Für $\varepsilon = 0$ gilt $\Delta^I - n_o = O\left(\frac{1}{D^2}\right)$. Dieser Effekt geht auf die diskrete Behandlung des Verunreinigungsspins zurück. Das Resultat zeigt, daß für die vorausgesetzte große Ausdehnung der ungestörten Solitonen diese Ungenauigkeit durch den Anschluß der verschiedenen Bereiche vernachlässigbar ist.

ii) Für $\varepsilon < 0$ ist $\Delta^I - n_o$ positiv. Da damit gleichzeitig $\Delta^{III} - n_o$ negativ ist ($\Delta^{III} - n_o = n_o - \Delta^I$), ergibt sich eine Kontraktion des Solitons, wie sie am Beispiel sehr schmaler Solitonen in Fig. I.4

veranschaulicht ist (Kapitel I 4).

iii) Die Kontraktion des Solitons nimmt mit abnehmendem ε zu. Je größer D und damit die Breite des Solitons ist, desto geringer ist allerdings dieser Effekt.

iv) Für jedes D gibt es einen minimalen Wert von ε, ε_{min}, unterhalb dessen es keine Lösung mit den Randbedingungen IV.7 mehr gibt. Umgekehrt gibt es damit zu vorgegebener Kopplungsstärke ε einen minimalen Wert von D für die Existenz eines Solitons. Das Inverse dieses Wertes, $D^{-1} = \left(\frac{g\mu_B B}{\tilde{J}}\right)^{1/2}$, legt gleichzeitig eine Obergrenze für das Magnetfeld fest. In Fig. IV.1 ist diese Grenzkurve als Funktion von ε angegeben. Speziell für sehr schwache

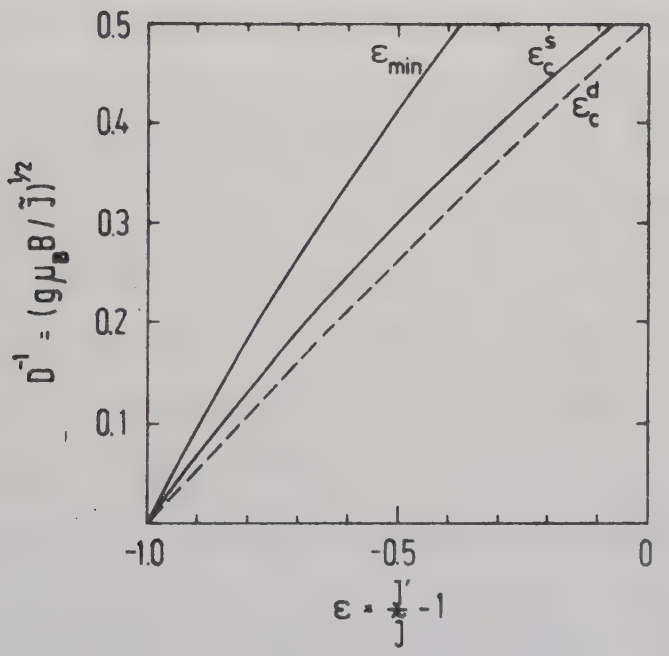


Fig. IV.1 Obere Grenze ε_{min} (·····), ε_c^s (------) und ε_c^d (———) für den Existenzbereich von Kink-Lösungen mit Schwerpunkt auf der Verunreinigung, für den Stabilitätsbereich statischer Kinks bzw den Stabilitätsbereich propagierender Kinks in der (D^{-1}, ε) - Ebene $(D^{-1} = (g\mu_B B/\tilde{J})^{1/2}$, $\varepsilon = J'/\tilde{J}-1)$. ε_c^s und ε_c^d werden in Kapitel IV.2.2 bzw. IV 3.1 eingeführt.

Kopplung ist der Existenzbereich für die Lösungen stark einge-

schränkt und verschwindet, wie zu erwarten ist, für $\varepsilon \to -1$.

IV 2.2 Stabilitätsanalyse

Um die Stabilität der symmetrischen Lösung zu untersuchen, werden die Gleichungen IV.12 um diese Lösung linearisiert. In Einklang mit der Kontinuumsbeschreibung in den Bereichen I und III sind dabei Terme der Ordnung $1/D^2$ zu vernachlässigen. In einer vollständigen Stabilitätsanalyse wären beliebige Abweichungen von der Spinkonfiguration des Kinks auch in den ungestörten Bereichen zu betrachten. Man kann hier jedoch die physikalische Natur des Problems ausnutzen. Während ohne Verunreinigung zum niedrigsten Eigenwert eine Anregung mit Wellenzahl $k \to 0$ gehört, ist mit Verunreinigung allenfalls die Abspaltung einer auf den Bereich der Verunreinigung lokalisierten Anregung vom Spinwellenkontinuum zu erwarten. Beide Typen von Anregungen lassen sich aber im Rahmen des Drei-Spin-Problems beschreiben. Tatsächlich zeigt die numerische Diagonalisierung des um die Kink-Lösung linearisierten Differenzengleichungssystems IV.4, daß man bei Beschränkung auf die drei effektiven Spins nicht nur eine obere Schranke für die auftretenden Instabilitäten erhält. Diese Instabilitäten werden vielmehr sogar quantitativ reproduziert. Dieses Ergebnis bleibt auch erhalten, wenn statt des Ansatzes IV.8 die aus dem Gleichungssystem IV.4 numerisch bestimmte Lösung verwendet wird. Die vernachlässigbaren Abweichungen der numerischen Lösung von dem im Rahmen des Ansatzes IV.8 berechneten Resultat rechtfertigen schließlich auch die Form dieses Ansatzes.

Mit den Umbenennungen der Indizes $n_0-1 \to 1$, $n_0 \to 2$, $n_0+1 \to 3$ können

die linearisierten Gleichungen des Drei-Spin-Problems in der Form

$$\hat{G}\,\delta\vec{\varphi} = E\,\hat{1}\,\delta\vec{\varphi} \qquad \text{IV.14}$$

mit $G_{ij} = \left.\frac{\partial \tilde{F}_i}{\partial \varphi_j}\right|_{\{\varphi_i\}=\{\varphi_i^K\}}$ zusammengefaßt werden. Als Folge der Nächst-Nachbar-Kopplung der Spins gilt $G_{13}=G_{31}=0$. Wegen der Inversionssymmetrie bezüglich des Gitterplatzes der Verunreinigung sowie "actio=reactio" sind von den verbleibenden sieben Matrixelementen nur drei unabhängig: $G_{11}=G_{33}$, G_{22}, $G_{12}=G_{21}=G_{23}=G_{32}$. Die drei möglichen Typen von Normalmoden sind in Fig. IV.2 veranschaulicht. Sie haben die Form (1,0,1), (1,|a|,1) sowie (1,-|a|,1). Dabei be-

Fig. IV.2 Mögliche Eigenmoden für das Eigenwertproblem IV.14

zeichnet die zweite Komponente jeweils die Auslenkung des Spins der Verunreinigung. Das Eigenwertproblem IV.14 läßt sich durch die Transformation

$$\begin{aligned} \chi_1 &= (\delta\varphi_1 - \delta\varphi_3)/2 \\ \chi_2 &= \delta\varphi_2 \\ \chi_3 &= (\delta\varphi_1 + \delta\varphi_3)/2 \end{aligned} \qquad \text{IV.15}$$

weiter vereinfachen, da die zum Inversionszentrum symmetrische Mode χ_1 separiert. Für den dazugehörigen Eigenwert sowie die verbleibenden Eigenwerte ergibt sich

$$E_1 = 2G_{11} \qquad \text{IV.16a}$$

$$E_{2,3} = (G_{22}+G_{12})/2 \pm ((G_{22}-G_{12})^2/4 + 4G_{12}^2)^{1/2}. \qquad \text{IV.16b,c}$$

E_3 ist immer der niedrigste Eigenwert und liefert damit den Stabilitätsbereich. Am Beispiel von D = 5 ist dieser Eigenwert als Funktion von ε in Fig. IV.3 aufgetragen. Für $\varepsilon = 0$ gilt $E_3 = 0$. der da-

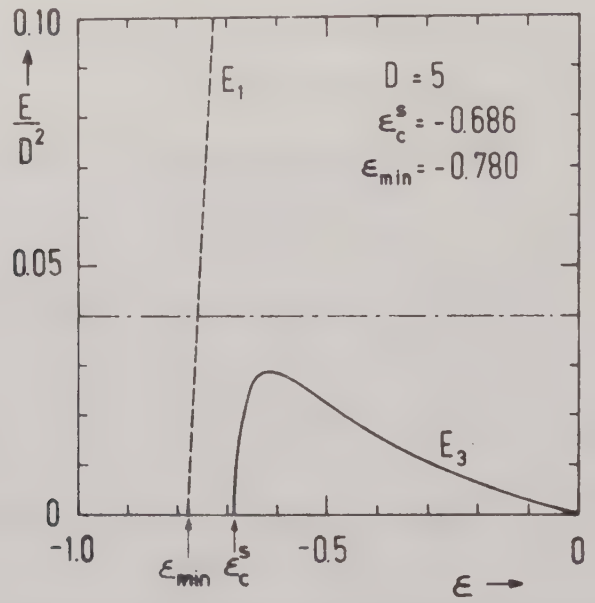


Fig. IV.3 Eigenwerte E_1 (Gl. IV.16a) und E_3 (Gl. IV.16c) der Stabilitätsanalyse für D = 5 als Funktion von ε. ε_{min} und ε_c^s entsprechen Fig. IV.1.

zugehörende Eigenvektor hat die Form $\mathrm{sech}\left(\frac{n-n_o}{D}\right) \propto \frac{\partial \varphi^K}{\partial \tilde{z}}$. Die Mode entspricht damit in diesem Grenzfall der bekannten Goldstone-Mode der Kontinuumstheorie (siehe Kapitel I 2.2). In Fig. IV.3 ist zu sehen, daß E_3 mit abnehmendem ε zunächst wächst, dann jedoch wieder kleiner wird. Bei einem kritischen Wert $\varepsilon_c^s(D)$, der deutlich größer als ε_{min} ist, gilt wieder $E_3 = 0$. Der entsprechende Eigenvektor ist von der Form $\vec{\chi} = (0, \alpha, \beta)$ mit $\alpha >> \beta$ und deutet damit an, daß der Kink gegen Störungen des Spins der Verunreinigung instabil wird. Der physikalische Grund liegt darin, daß die Austauschwechselwirkung für die in Fig. IV.4 skizzierte Orientierung der zur Verunreinigung benachbarten Spin nicht von der Orientierung des Spins der Verunreinigung selbst abhängt. Bei ε_c^s liegt aber gerade die

gezeigte Konfiguration vor. $\varphi_{n_o} = \Pi$ ist unter Berücksichtigung des Magnetfeldes offensichtlich eine instabile Lage für den Verunreinigungsspin. Durch die kritische Mode kann der Kink zerstört werden und gegen die Konfiguration IV.6 relaxieren. Fig. IV.4 macht aber

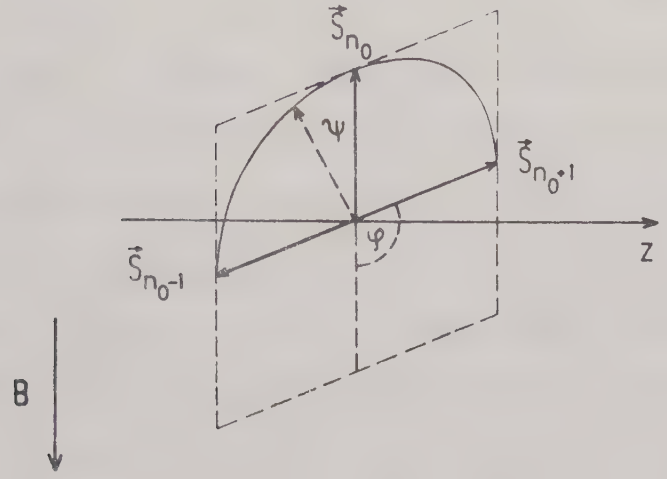


Fig. IV.4 Instabile Konfiguration für das Drei-Spin-Problem

auch noch einmal deutlich, daß der topologische Zerfall von anderer Natur als der in Abschnitt II diskutierte Fall ist (vgl. Fig. II.4).

Um die Stabilitätsanalyse zu vervollständigen, ist zu bemerken, daß E_2 immer positiv ist und zudem außerhalb des in Fig. IV.3 gezeigten Energiebereichs liegt. Dagegen verschwindet E_1 bei ε_{min}. Die Stabilitätsgrenze gegenüber Störungen der Form $\vec{\chi} = (\gamma,0,0)$ stimmt damit mit der Grenze des Existenzbereiches der Lösungen überein. Diese Form der Störung ist aber auch äquivalent zu einer kleinen Änderung des Magnetfeldes und entspricht deshalb der von Hagedorn (1970) diskutierten "feldinduzierten Instabilität". Zum Vergleich mit ε_{min} ist ε_c^s ebenfalls in Fig. IV.1 eingezeichnet. Man sieht, daß die Beschränkung auf die feldinduzierte Instabilität

im vorliegenden Fall nicht ausreicht, da ε_{min} die Stabilität des Kinks deutlich überschätzt.

Zum Abschluß sei darauf hingewiesen, daß mit dem Eigenwertproblem IV.14 wirklich die dynamische Stabilität des statischen Kink im Sinne von Abschnitt II untersucht wird. Die dort vorliegende Schwierigkeit tritt nicht auf, da hier energetische und dynamische Stabilitätsanalyse übereinstimmen. Schließlich sei noch einmal auf die Bemerkung zur topologischen Stabilität der Solitonen im reinen System (Kapitel IV 1) eingegangen. Die beschriebene Instabilität kann im Prinzip auch ohne Verunreinigung auftreten. Da die in Fig. IV.4 gezeigte Konfiguration für $D > 1$ nicht auftritt, ist die Instabilität in diesem Fall ohne praktische Bedeutung.

IV 3 Dynamik

IV 3.1 Lokalisierungspotential

Für propagierende Solitonen gibt es keine allgemeine analytische Lösung. Wie schon die in Kapitel IV 1 angesprochenen Untersuchungen zeigen, stellt die Verunreinigung jedoch ein lokalisiertes Potential für das Soliton dar. Qualitativ ist daher als Folge der Energieerhaltung zu erwarten, daß das Soliton auf die Verunreinigung zu beschleunigt wird. Fig. IV.5 zeigt als Beispiel die potentielle Energie eines Kink mit $D = 5$ bei einer Kopplungsstärke $\varepsilon = -0.5$ als Funktion des Ortes, an dem sich der Schwerpunkt des Kink befindet. Die gestrichelte Kurve gibt zu jedem Wert der potentiellen Energie zusätzlich den Ort an, an dem für die dazugehörende Kink-Konfiguration $\varphi = \Pi$ ist. Damit wird aus der Figur deutlich, daß bei

kleiner Kopplungsstärke nicht nur das Potential vergleichsweise tief ist (siehe Craik und Hill 1974), sondern der Kink zusätzlich bei einer Verschiebung über die Verunreinigung einer deutlichen Deformation unterliegt. Diese Deformation ist eine mögliche Ur-

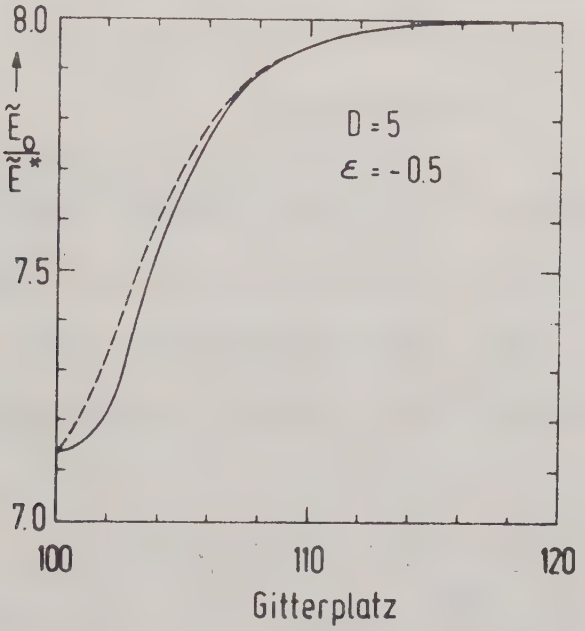


Fig. IV.5 Lokalisierungspotential für D = 5 und ϵ = 0.5 mit einer Verunreinigung am Gitterplatz 100. Aus der gestrichelten Kurve ist zu jedem Wert der potentiellen Energie der Ort abzulesen, an dem für die entsprechende Konfiguration $\varphi = \pi$ ist.

sache dafür, daß die Streuung des Solitons an der Verunreinigung inelastisch wird. Zwei weitere Aspekte sind noch zu berücksichtigen. Zum einen können Solitonen bei einem sehr starken Energieverlust an der Verunreinigung lokalisiert werden. Zum anderen kann aber auch ein topologischer Zerfall stattfinden.

Für die topologische Instabilität ist nun wichtig, daß bei einer Beschleunigung die Breite des Solitons abnimmt. Dementsprechend wird die Instabilität schon bei einem größeren Wert von D, und damit einem kleineren Magnetfeld, als im statischen Fall auftreten. Die Beschleunigungseffekte kann man abschätzen, indem man die Be-

schleunigung eines idealen SG-Solitons in dem Lokalisierungspotential betrachtet und die aus der SG-Gleichung resultierende Lorentzkontraktion berechnet. In den hier verwendeten Einheiten ist der Energie-Geschwindigkeits-Zusammenhang für das ideale SG-Soliton durch

$$E(u) = 8\gamma \qquad \text{IV.17}$$

mit $\gamma = (1-u^2)^{-1/2}$ gegeben. Die Geschwindigkeit wird dabei wie in Abschnitt II in Einheiten von c_o angegeben. Für ein Soliton, das im Unendlichen ruht, folgt der maximale Lorentzfaktor γ_{max} aus dem Maximalwert der kinetischen Energie in einem Potential der Tiefe ΔV:

$$8(\gamma_{max} - 1) \stackrel{!}{=} 8 + \Delta V \; . \qquad \text{IV.18}$$

Wie die Potentialtiefe ΔV, so ist auch die minimale Solitonenbreite

$$2 D_{min} = 2 D \gamma_{max}^{-1} \qquad \text{IV.19}$$

eine Funktion von ε und D. Die Stabilitätsgrenze ergibt sich entsprechend, wenn man die Nullstelle von E_3 (Gl. IV.16a) mit D_{min} aus Gl. IV.19 anstelle von D selbstkonsistent auswertet. Die resultierende kritische Kurve $\varepsilon_c^d(D)$ ist in Fig. IV.1 zu sehen. Sie zeigt die erwartete Einschränkung des Stabilitätsbereiches aufgrund dynamischer Effekte. Die Überlegungen dieses Kapitels lassen sich natürlich auch direkt auf den Fall von Antisolitonen übertragen.

IV 3.2 Numerische Simulation

Um die Schlußfolgerungen des vorherigen Kapitels zum dynamischen Fall zu überprüfen, wurde die Solitonendynamik unter dem Einfluß von Verunreinigungen simuliert. Die Grundlage bildet dabei wie in Kapitel II 4 eine Kette von 200 Spins. Die Zeitentwicklung der Winkel φ_n wird durch die Gleichungen

$$\frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial t^2} = -F_n(\varphi_{n+1}, \varphi_{n-1}; \varphi_n) \qquad \text{IV.20}$$

mit F_n aus Gleichung IV.4 beschrieben, wobei die Gesamtenergie wiederum erhalten bleibt. Die Zeit ist hier in Einheiten $\omega_o^{-1} = D\frac{a}{c_o}$ gegeben und für den Ort der Verunreinigung ist die Kettenmitte $n_o = 100$ gewählt. Als Anfangskonfiguration ($t = 0$) wird für die φ_n's die diskretisierte Form des exakten SG-Solitons (bzw entsprechend den Randbedingungen in Gl. IV.7 die eines Antisolitons) aus der Kontinuumstheorie mit einem weit von der Verunreinigung entfernten Schwerpunkt verwendet. Das Soliton befindet sich damit anfangs im ungestörten Bereich und wegen $D >> 1$ spielen daher im Gegensatz zu Kapitel II 4 Relaxationseffekte keine Rolle (siehe auch Kapitel I 4). Am Beispiel $D = 5$ zeigen die Figuren IV.6-9 Ergebnisse typischer Simulationen mit Anfangsgeschwindigkeit $u = 0.5$ für verschiedene Kopplungsstärken. Die Stärke der Kopplung nimmt dabei von Figur zu Figur ab, d.h. die Parameter durchlaufen eine Gerade im Abstand 0.2 zur Abszisse in Fig. IV.1 von rechts nach links. Gezeigt ist jeweils nur ein Ausschnitt der Kette um die Verunreinigung. Die verschiedenen Kurven einer Figur bestehen aus Polygonzügen durch die verschiedenen diskreten φ_n-Werte und veranschaulichen die jeweilige Solitonenkonfiguration zu einem gegebenen Zeitpunkt. Nur bei großen Winkeldifferenzen im Bereich der Verunreinigung wird die Form des

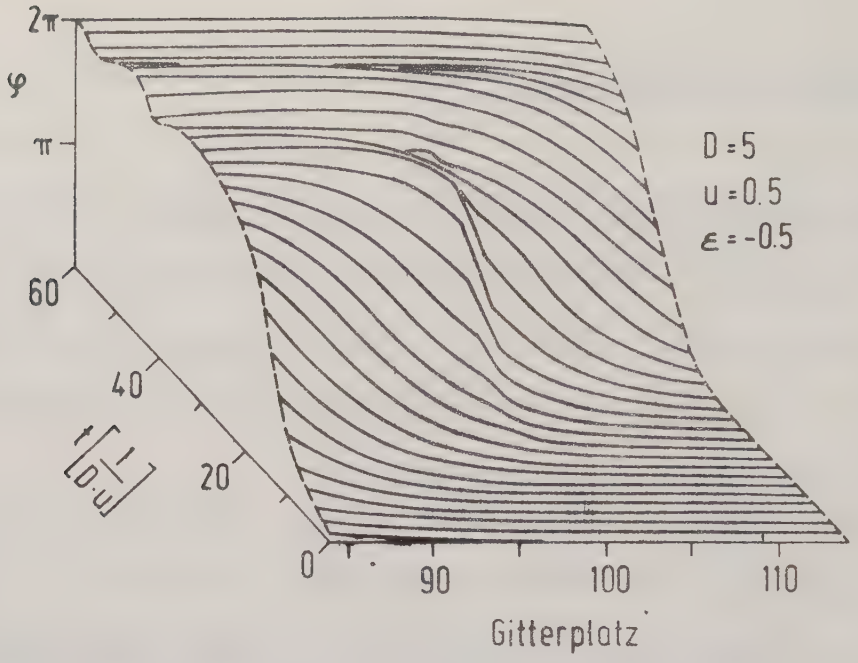


Fig. IV.6 Inelastische Streuung eines Antisolitons mit D = 5 und Anfangsgeschwindigkeit u = 0.5 an einer Verunreinigung mit ε = -0.5.

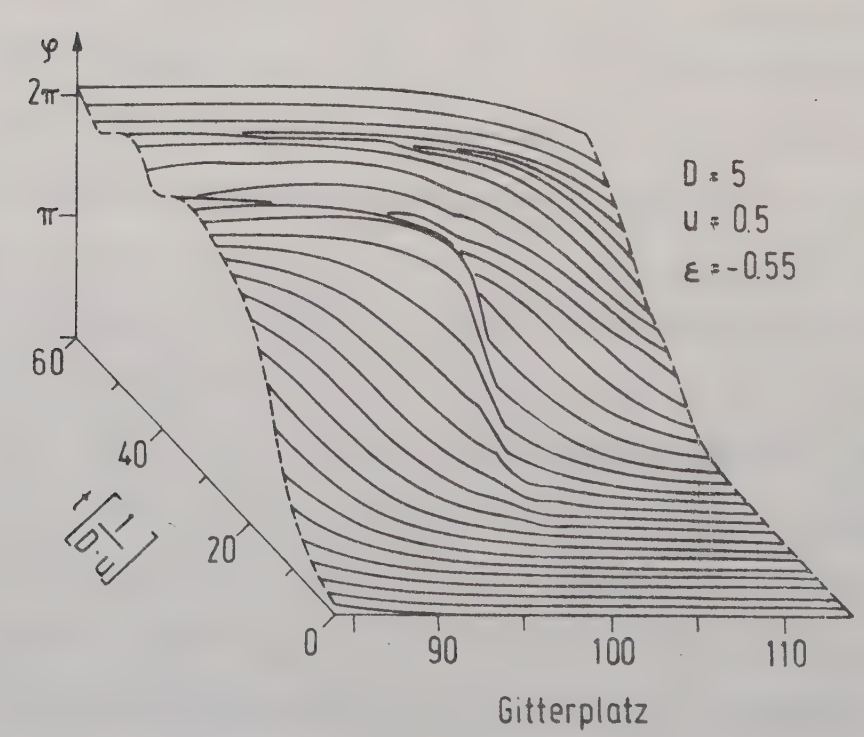


Fig. IV.7 Inelastische Streuung eines Antisolitons mit D = 5 und Anfangsgeschwindigkeit u = 0.5 an einer Verunreinigung mit ε = -0.55.

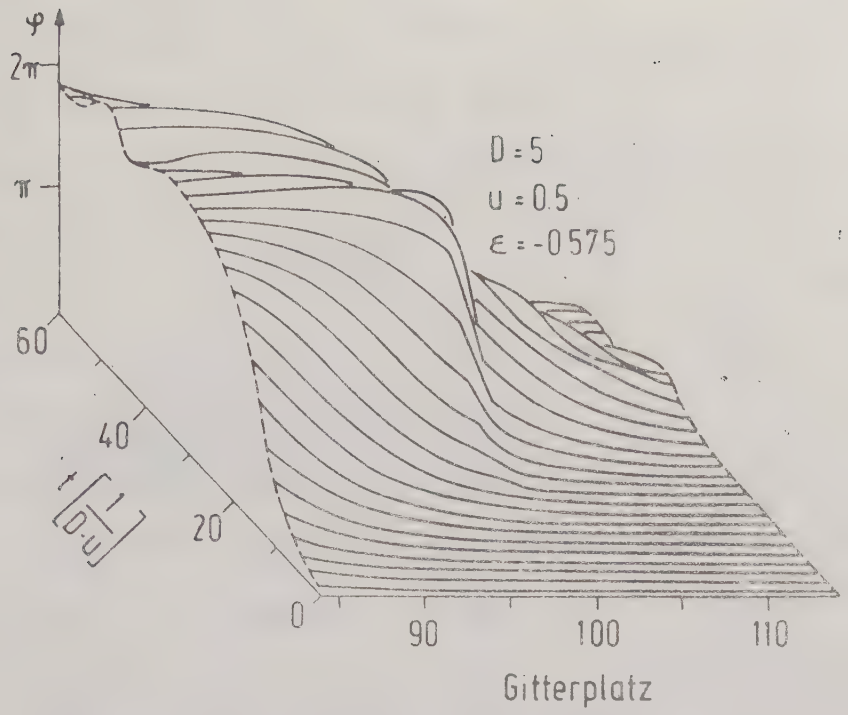


Fig. IV.8a Lokalisierung eines Antisolitons mit D = 5 und Anfangsgeschwindigkeit u = 0.5 an einer Verunreinigung mit ε = -0.575.

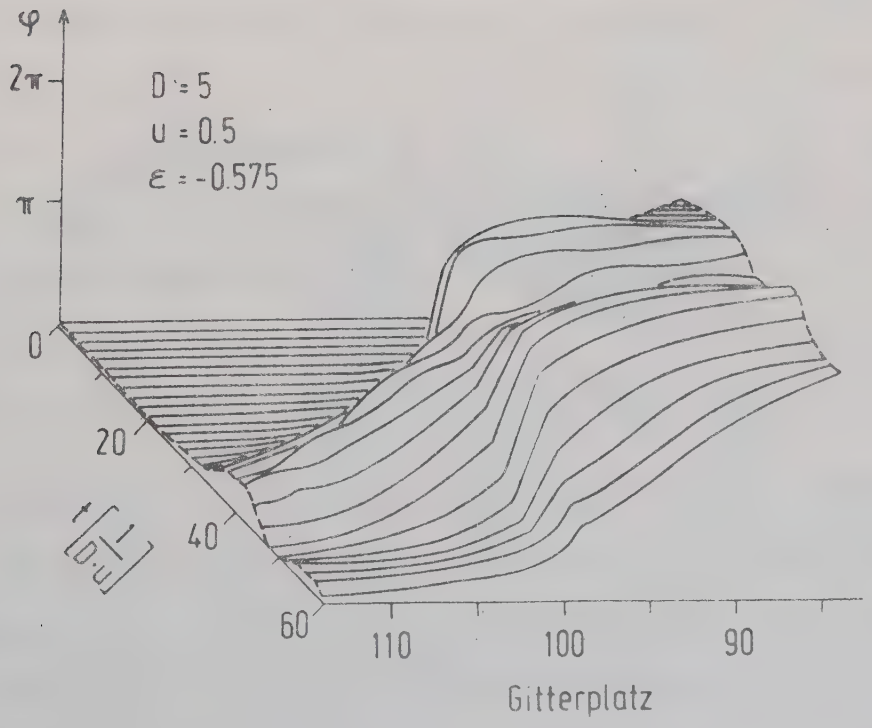


Fig. IV.8b Fig. IV.8a um 180° gedreht.

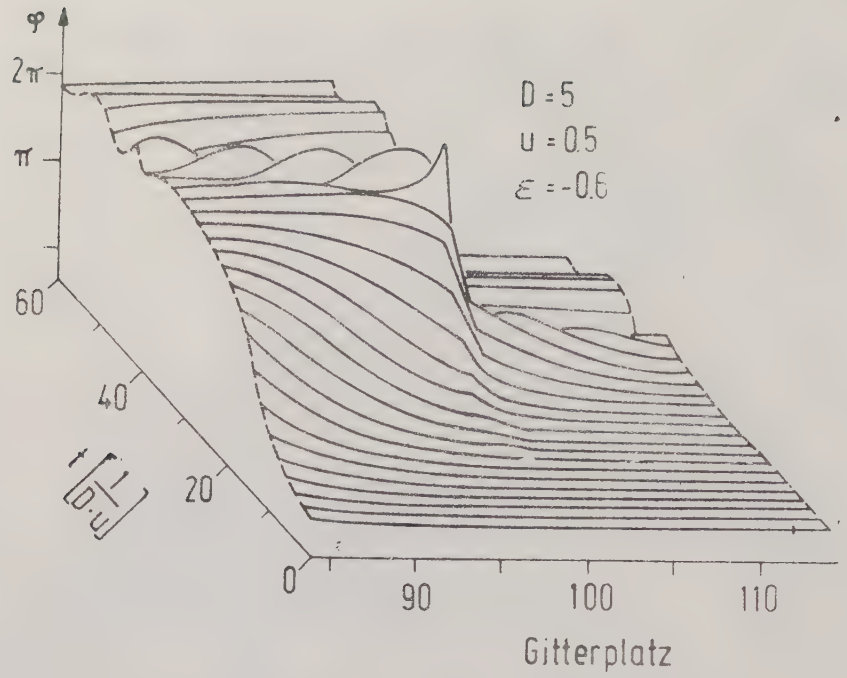


Fig. IV.9a Vernichtung eines Antisolitons mit D = 5 und einer Anfangsgeschwindigkeit u = 0.5 an einer Verunreinigung mit ε = -0.6.

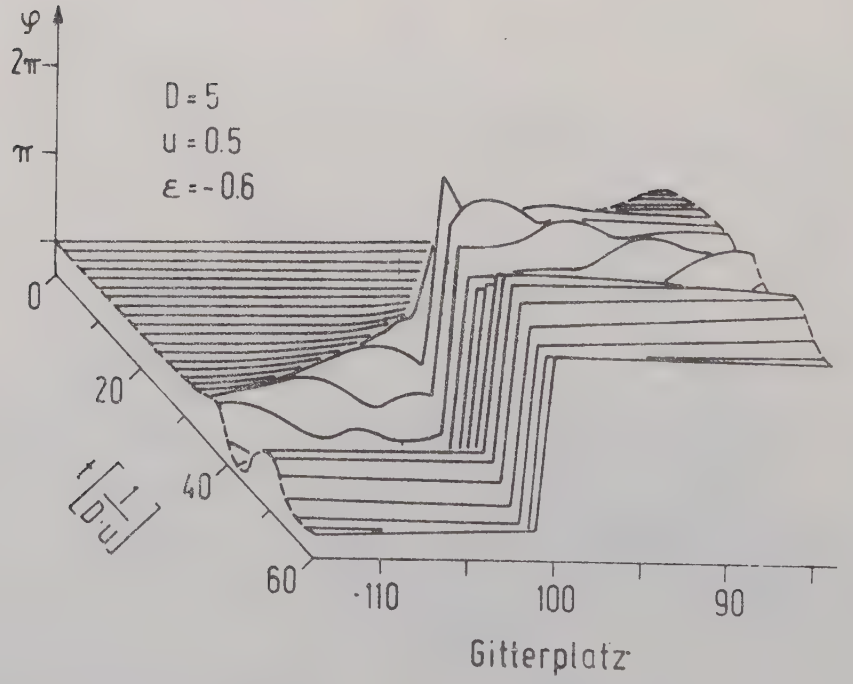


Fig. IV.9b Fig. IV.9a um 180° gedreht. Deutlich wird die Relaxation gegen die Lösung in Gl. IV.6.

Polygonzuges und damit die diskrete Natur der Spinkette deutlich (siehe Knicke in Fig. IV.6 z.B. bei t = 28).
In allen Fällen bestätigt die Beschleunigung des Antisolitons auf die Verunreinigung zu die Vorstellung von einem attraktiven Lokalisierungspotential. Erwartungsgemäß ist die Streuung nur für kleine Abweichungen der Kopplungsstärke der Verunreinigung von dem Wert im reinen System elastisch. Die zunehmend inelastische Streuung bei abnehmender Kopplungsstärke ist mit der Anregung von Magnonen verbunden. In Fig. IV.6 und IV.7 sind diese Magnonen neben der Kontraktion des Kink deutlich zu erkennen. Der in Fig. IV.8 gezeigte Fall ist ein Beispiel für die Lokalisierung eines Antisolitons an der Verunreinigung als Folge des großen Energieverlustes durch die erzeugten Magnonen. Ist schließlich der kritische Wert ε_c^d erreicht (Fig. IV.9), findet man die erwartete topologische Instabilität. Vor allem in Fig. IV.9b ist der Zerfall des Antisolitons in Magnonen, die in entgegengesetzte Richtungen auseinanderlaufen, und die Relaxation gegen eine Lösung der Form von Gl. IV.6 zu beobachten. In Fig. IV.10 sind die Ergebnisse für D = 5 und verschiedene Anfangsgeschwindigkeiten zusammengefaßt. Aus dieser Figur ist zu entnehmen, daß die Resultate der numerischen Simulation in guter Übereinstimmung mit den theoretischen Vorhersagen sind. Dies bestätigen auch die Ergebnisse für D = 10, die in Fig. IV.11 zu sehen sind.

Zusätzlich wurde noch der Charakter der Lösungen für Kopplungsstärken unterhalb des kritischen Wertes untersucht. Man findet eine inelastische Reflexion der Solitonen bzw. Antisolitonen an der Verunreinigung. Der Energieverlust kommt dadurch zustande, daß bei der Reflexion trotz der in diesem Fall schwachen Kopplung an die Verunreinigung immer ein kleiner Energieanteil in Form von Magnonen über die Verunreinigung hinweg propagiert. Die Situation ist daher vergleich-

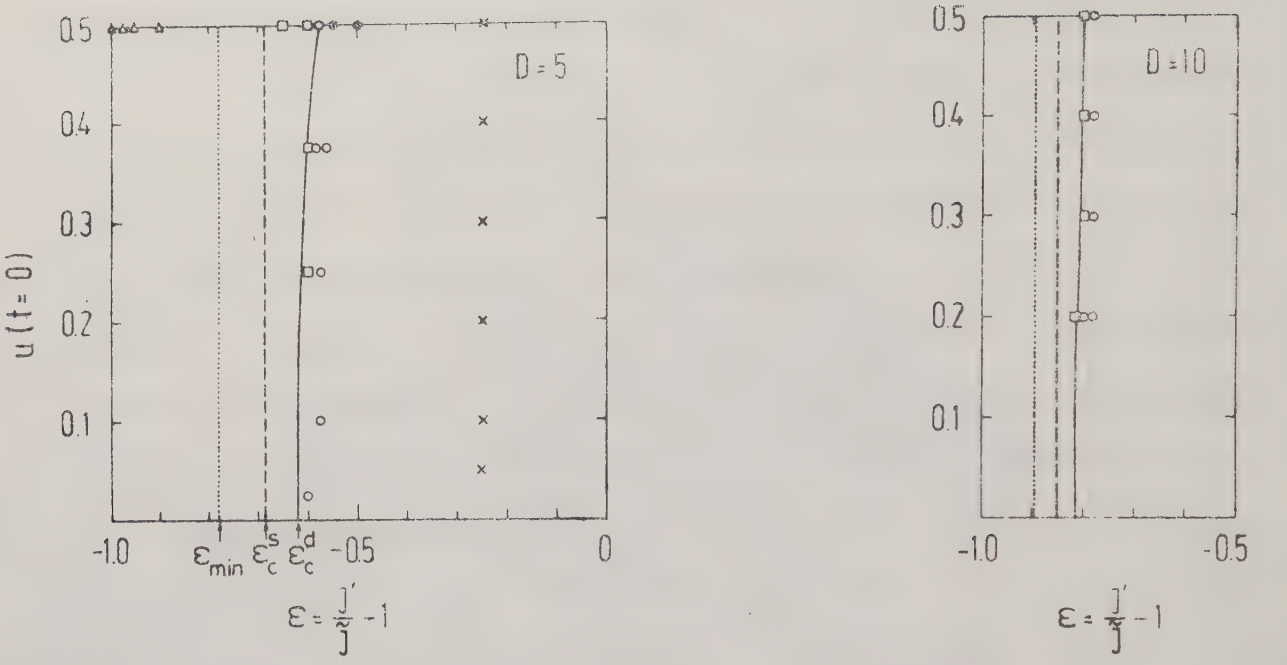


Fig. IV.10 Numerische Resultate für die Streung von Antisolitonen mit D = 5 und Anfangsgeschwindigkeit u an einer Verunreinigung mit Kopplungsstärke $\varepsilon = J'/\tilde{J} - 1$: x elastische bzw ● inelastische Propagation, o Lokalisierung, □ Vernichtung sowie △ inelastische bzw ▲ elastische Reflektion des jeweiligen Antisolitons. Die Fig. IV.1 entsprechenden Werte von ε_{min}, ε_c^s und ε_c^d sind eingezeichnet, wobei letzterer die kinetische Energie bei t = 0 berücksichtigt.

Fig. IV.11 Numerische Resultate für Antisolitonen mit D = 10 analog Fig. IV.10.

bar mit der Reflexion eines Solitons am passiven Ende eines Josephson-Kontaktes endlicher Länge (Christiansen und Olsen 1980, Salerno 1981). Nur bei einer Unterbrechung in der Kette gibt es keinen Energieverlust. Deshalb wird bei $\varepsilon = -1$ (Fig. IV.12) die bereits mehrfach erwähnte elastische Reflexion (Perring und Skyrme 1962) reproduziert. Zu ergänzen ist, daß natürlich auch Solitonen mit einer Kopplungsstärke geringfügig unterhalb der kritischen Kopplung einen so starken

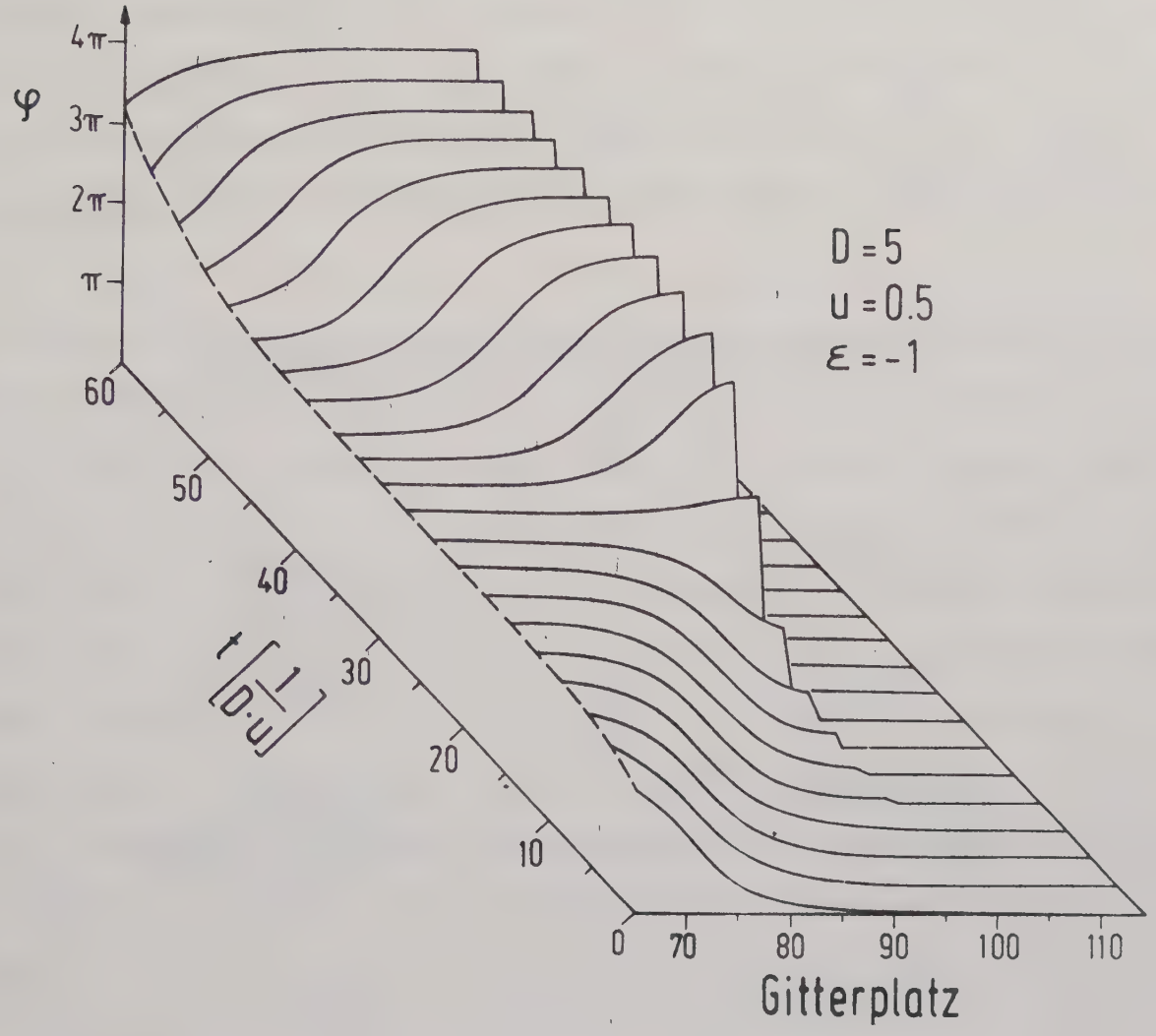
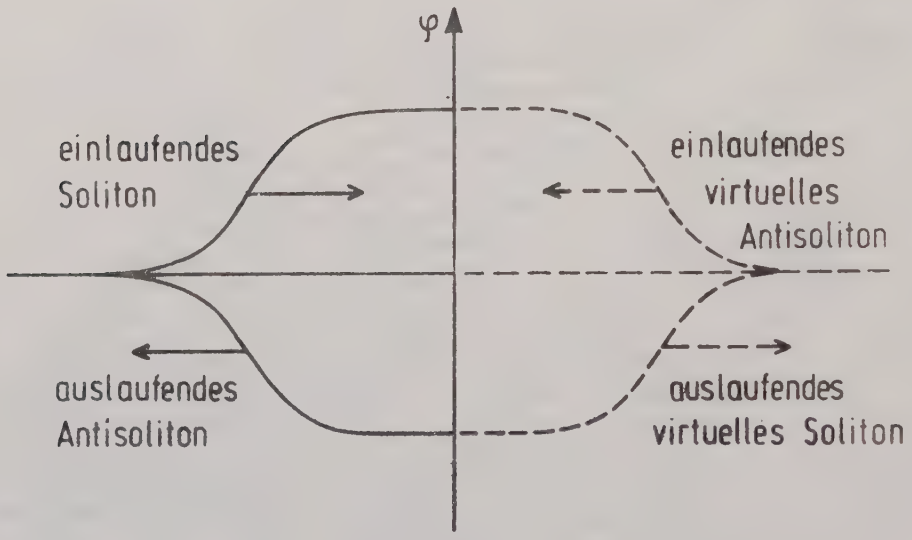


Fig. IV.12 Reflektion eines Antisolitons mit D = 5 und Anfangsgeschwindigkeit u = 0.5 an einer Kettenunterbrechung $\varepsilon = -1$.

Energieverlust erleiden, daß sie analog dem Lokalisierungsprozeß bei $\varepsilon \gtrsim \varepsilon_c^d$ das Lokalisierungspotential nicht mehr verlassen können. Der Charakter der resultierenden lokalisierten Schwingung wird klar, wenn man sich vergegenwärtigt, daß die Reflexion eines Solitons am freien Ende eines halbunendlichen Systems aus Symmetriegründen auch als Streuung an einem "virtuellen" Antisoliton in einem unendlich

ausgedehnten System aufgefaßt werden kann (Perring und Skyrme 1962). Die folgende Skizze verdeutlicht, daß sich die Streuung im unendlichen System gerade aus einer Spiegelung des halbunendlichen Systems (durchgezogene Linien) an seinem Ende ergibt. Im Schwerpunkt des

Reflektion eines Solitons am freien Kettenende



Soliton-Antisoliton-Paares gilt dann entsprechend der Randbedingung eines freien Endes $\frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0$, so daß durch die Spiegelung keine zusätzliche Energie in den realen Halbraum eingeführt wird. Entsprechend dem Energieverlust bei der Reflexion ist eine Störung bei der Streuung zu berücksichtigen (Salerno 1981). Damit ist der Anschluß an die in Kapitel I 2.3 geschilderten Ergebnisse hergestellt. Die lokalisierte Schwingung bei starkem Energieverlust bei der Streuung entspricht dann einfach der realen Hälfte des Pulsatons, das durch die Bindung von Soliton und virtuellem Antisoliton entsteht.

Abschließend sei darauf hingewiesen, daß sich der Energieanteil der bei der Streuung erzeugten Magnonen im Prinzip mit der kürzlich

von Klinker (1983) sowie Klinker und Lauterborn (1983) am Beispiel eines Toda-Gitters mit Verunreinigung vorgestellten Methode quantitativ auswerten läßt. Dabei wird die aus der numerischen Simulation gewonnene Konfiguration nach der Streuung als Anfangskonfiguration für die Bestimmung des Spektrums der Anregungen im Rahmen der Inversen Streutheorie verwendet. Die bei diesen Autoren im Vordergrund stehende Frage nach der Existenz von Solitonen nach der Streuung ist im SG-Modell allerdings weniger interessant, da der topologische Erhaltungssatz die Existenz des Solitons nach der Streuung garantiert, sofern es nicht zerfallen ist. Außerdem kann die Zahl der Solitonen im SG-Fall bei der Streuung natürlich nicht zunehmen. Der topologische Erhaltungssatz ist auch der Grund dafür, daß im vorliegenden Fall die Kenntnis der Solitonenbewegung in einem begrenzten Bereich um die Verunreinigung ausreicht. Ohne Bedeutung ist deshalb die Wahl der Randbedingungen.(Bei den Simulationen zu Abschnitt IV werden freie Randbedingungen für die Spinkette verwendet.)

IV 4 Systeme mit Π-Kink

In Systemen mit Π-Kink wie beispielsweise bei TMMC ist der Austauschterm in Gl. IV.2 (vgl. Gl. I.19a) durch den Ausdruck IV.19b,

$$f_{\Pi} = 2\left(1 - \cos\left(\frac{\varphi_n - \varphi_{n+1}}{2}\right)\right) \quad , \qquad \text{I.19b}$$

zu ersetzen, da das SG-Soliton in diesem Fall ja das Doppelte des Winkels zwischen der Richtung der Spins und deren Orientierung im Grundzustand beschreibt. Man sieht an der Periodizität von f_{Π} bezüglich $\frac{\varphi_n - \varphi_{n+1}}{2}$ sofort, daß auch im Fall der Π-Domänenwände eine

Reflexion stattfinden kann, wenn eine endliche Kopplungsstärke vorliegt. Damit ist auch für π-Kinks ein kritische Magnetfeld zu erwarten, oberhalb dessen die Verunreinigung effektiv wie eine Unterbrechung der Spinkette wirkt. Ein wesentlicher Unterschied zum Fall der 2π-Kinks besteht allerdings darin, daß die Energie der durch Gl. IV.6 beschriebenen Konfiguration mit IV.19b nur für gerade m verschwindet. Entsprechend spielt auch die mit der in Fig. IV.4 gezeigten Konfiguration verbundenen Instabilität hier keine Rolle. Man kann deshalb davon ausgehen, daß der Übergang zu einer effektiven Kettenunterbrechung mit einer zur feldinduzierten Instabilität (vgl. Kapitel IV 2.2) vergleichbaren Instabilität verknüpft ist. Damit ist der Stabilitätsbereich für propagierende Solitonen größer als im Falle der 2π-Kinks.

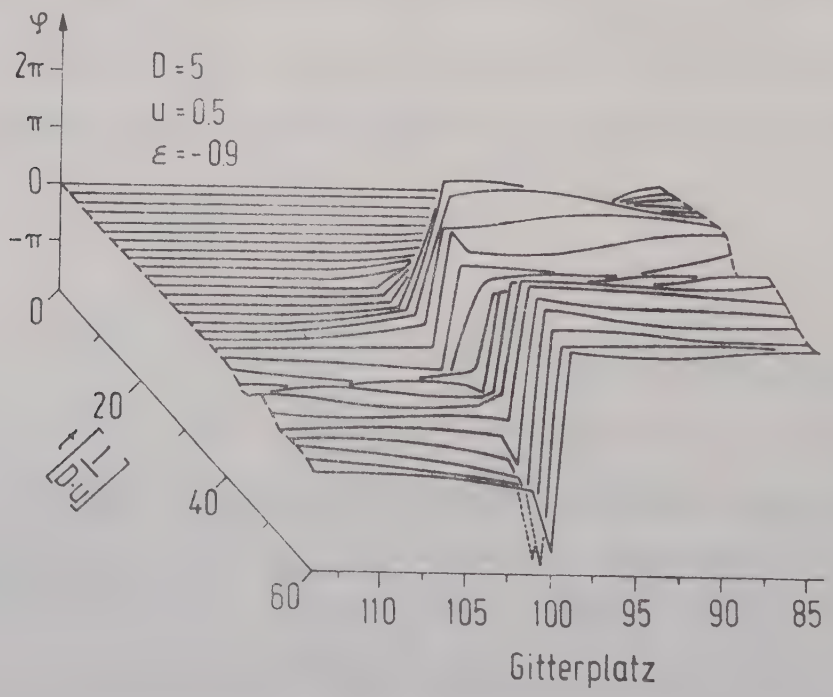


Fig. IV.13 Vernichtung einer π - Domänenwand mit D = 5 und Anfangsgeschwindigkeit u = 0.5 an einer Verunreinigung mit ε = -0.9. Man beachte die deutlich ausgeprägte lokalisierte Anregung im Bereich der Verunreinigung. (Vgl. Fig. IV.9b)

Erste Resultate von Simulationen der Dynamik von Π-Kinks zeigen, daß tatsächlich mit dem Fall der 2Π-Kinks (Fig. IV.10 und IV.11) vergleichbare Ergebnisse zu beobachten sind. Der Stabilitätsbereich ist erwartungsgemäß größer. Für D = 5 z.B. erfolgt die Vernichtung des Kinks an der Verunreinigung erst für $\varepsilon \approx -0.9$. Fig. IV.13 zeigt diese Situation, die der in Fig. IV.9 dargestellten Vernichtung des 2Π-Kink mit D = 5 entspricht. An Fig. IV.13 wird jedoch auch ein neuer Aspekt der Streuung von Π-Kinks an einer Verunreinigung deutlich. Entgegen dem 2Π-Fall ist die Anregung einer lokalisierten Schwingung der Verunreinigung zu beobachten. Da solche lokalisierten Schwingungen keine Dispersion zeigen, sind sie experimentell von den üblichen Magnonen zu unterscheiden. Auf diesem Wege ist damit eventuell ein indirekter experimenteller Nachweis der Streuung von Solitonen an Verunreinigungen möglich. Bisher vorliegende theoretische Untersuchungen der Spindynamik in verunreinigten Ketten (Lovesey 1981, Patzak und Mikeska 1981) haben diesen Aspekt noch nicht berücksichtigt.

IV 5 Zusammenfassung

Die Untersuchungen dieses Abschnittes haben erste Ergebnisse zum Einfluß von Verunreinigungen beliebiger Kopplungsstärke auf die Dynamik von Solitonen geliefert, die sowohl über bisher vorliegende störungstheoretische Resultate als auch über eine Kontinuumsbeschreibung hinausgehen. Die diskrete Behandlung des Verunreinigungsspins ermöglicht die Beschreibung einer kontinuierlichen Abnahme der Kopplungsstärke der Verunreinigung vom reinen (unendlichen) System bis hin zu einer Unterbrechung der Spinkette (halbunendliches Sy-

stem). Aufgrund der mit einer Abnahme der Kopplungsstärke verbundenen zunehmenden Winkeldifferenzen zwischen dem Spin der Verunreinigung und seinen nächsten Nachbarn, ist die Periodizität des Austauschterms bezüglich dieser Winkeldifferenzen im System mit Verunreinigung wesentlich. Diese Periodizitätseigenschaft verletzt den topologischen Erhaltungssatz der SG-Theorie und stellt den wesentlichen Unterschied des magnetischen Systems in Vergleich zu dem mechanischen Modell der Pendelkette (Kapitel I 1) dar.

Die Verletzung des topologischen Frhaltungssatzes hat zur Konsequenz, daß Solitonen topologisch instabil werden, wenn das Magnetfeld eine kritische Stärke erreicht. Die numerische Simulation zeigt darüberhinaus, daß das kritische Magnetfeld ein Kriterium dafür liefert, ob die Spinkette mit Verunreinigung für ein propagierendes Soliton effektiv unterbrochen ist. So kann ein Soliton über die Verunreinigung hinweg propagieren, wenn die Stärke des Magnetfeldes klein gegen den kritischen Wert ist. Das Soliton wird dagegen reflektiert, wenn das Magnetfeld groß gegen das kritische Feld ist.

Wichtig ist nun, daß ein Soliton unabhängig davon, ob es über die Verunreinigung hinweg propagiert oder an dieser reflektiert wird, einen zunehmenden Energieverlust bei der Streuung erleidet, wenn die Stärke des Magnetfeldes gegen den kritischen Wert geht. Dieses Resultat der Simulation bestätigt die eingangs erwähnte Vorstellung von der inelastischen Streuung der Solitonen an einem durch die Verunreinigung hervorgerufenen lokalisierten Potential. Über die phänomenologische Vorstellung hinaus verdeutlichen die Ergebnisse aber auch, daß die Dämpfung der Solitonen durch das Magnetfeld beeinflußbar ist. Eine Änderung des Magnetfeldes bewirkt eine Änderung der kritischen Kopplungsstärke. In realen Situationen ist nun die

Kopplungsstärke der Verunreinigung vorgegeben. Je nachdem, ob die kritische Kopplung bei einer Änderung des Magnetfeldes näher an diesen gegebenen Wert heranrückt oder sich davon entfert, wird die Dämpfung zu bzw. abnehmen.

Dieses Resultat hat wichtige Auswirkungen auf Neutronenstreuexperimente. Nach der erwähnten phänomenologischen Behandlung ist bei einer gegebenen Kink-Dichte n_K ein diffuses Regime für die Kink-Bewegung zu erwarten, wenn die Streuung so stark ist, daß die mittlere freie Weglänge ℓ kleiner als der mittlere Abstand der Kinks ist ($n_K \ell >> 1$). Im Grenzfall starker Dämpfung reduziert sich der dynamische Strukturfaktor für die propagierenden Kinks auf (Anhang):

$$S(q,\omega) \propto \{M(q,u)\}^2 \, e^{-\beta E_K(u)}\Big|_{u=O} \; \frac{\mathcal{D}}{(\mathcal{D}\,q)^2 + (\frac{\omega}{q})^2} \quad . \qquad \text{IV.21}$$

Hier ist M(q,u) wieder der Kink-Formfaktor, $E_K(u)$ ist die Energie eines Kink mit der Geschwindigkeit u und $\mathcal{D}$ bezeichnet die Diffusionskonstante. Man beachte, daß sich der ideale Gas-Limes (Gl. II.35, sowie Anhang) aus IV.21 ergibt, wenn man $\mathcal{D} \equiv O$ und $u = \omega/q$ setzt.

Für $CsNiF_3$ beispielsweise sollte die Bestimmung der Magnetfeldabhängigkeit der Diffusionskonstante für Verunreinigungen mit kleiner Kopplungsstärke möglich sein, da dann das kritische Magnetfeld im experimentell relevanten Bereich liegt (Kapitel I 3). Noch einmal sei darauf hingewiesen, daß bei diesen Magnetfeldern im planaren Ferromagneten eine deutliche Energiebarriere für den in Abschnitt II beschriebenen topologischen Zerfall von SG-ähnlichen Solitonen existiert und es daher sinnvoll ist, den Einfluß der Verunreinigungen auf teilchenartige Anregungen im Rahmen des SG-Modelles gesondert zu behandeln.

In Hinblick auf die Fragestellung nach der Anwendbarkeit des Konzeptes teilchenartiger Anregungen sind weniger die mit der topolo-

gischen Instabilität verbundenen Lebensdauereffekte, die in IV.21 noch nicht berücksichtigt sind, interessant als vielmehr die Tatsache, daß auch bei extrem schwacher Kopplung teilchenartige Anregungen existieren. Dies umsomehr, als immer davon auszugehen ist, daß in einem realen System endliche Ketten mit mehr oder weniger freien Enden vorliegen. Für den dynamischen Strukturfaktor IV.21 sind Solitonen und Antisolitonen ununterscheidbar. Deshalb spielt die mit der Streuung eines Solitons in Form eines Antisolitons (sowie vice versa) verbundene Phasenänderung ($\frac{\partial\varphi}{\partial z} \rightarrow -\frac{\partial\varphi}{\partial z}$) keine Rolle. Nach den geschilderten Ergebnissen ist jedoch im Prinzip über die Magnetfeldabhängigkeit der Diffusionskonstanten eine Unterscheidung darüber möglich, ob Solitonen an der Verunreinigung reflektiert werden, oder ob sie darüber hinweg propagieren.

Erste Simulationen für den Fall von π-Kinks zeigen, daß abgesehen von einer Vergrößerung des Stabilitätsbereiches für propagierende ähnliche Resultate wie im Fall von 2π-Kinks zu beobachten sind. Ein zusätzlicher Aspekt bei der Streuung von π-Kinks an einer Verunreinigung ist die Anregung lokalisierter Schwingungen an der Verunreinigung. Weitere Untersuchungen zu diesem Effekt sind insbesondere in Hinblick auf die Frage interessant, ob damit ein indirekter experimenteller Nachweis der Streuung von Solitonen an Verunreinigungen möglich ist.

V Temperaturabhängigkeit der Solitonenbreite

In den vorangegangenen Abschnitten wurden thermische Fluktuationen nicht berücksichtigt. Diese sind jedoch bei endlichen Temperaturen immer vorhanden und können unter Umständen die Ergebnisse modifizieren. Eine Rechtfertigung für die bisherige Vernachlässigung ergab sich in Zusammenhang mit der Bestätigung des Teilchenbildes im Rahmen der klassischen statistischen Mechanik (Kapitel I 2.2). Erinnert sei hier noch einmal daran, daß die beschriebene Sattelpunktsmethode zur phänomenologischen Auswertung des Solitonenbeitrages zur Zustandssumme jedoch nur in niedrigster Ordnung in der Temperatur befriedigende Ergebnisse liefert. Bei dieser Sattelpunktsmethode werden nur lineare Abweichungen von der Solitonenlösung berücksichtigt. Der nichtlineare Charakter des Systems kommt allein durch die Phasenraumaufteilung zwischen den einzelnen Anregungen des Systems zum Ausdruck. Form und Energie der Solitonen werden dabei nicht modifiziert. Ebenfalls in Kapitel I 2.2 wurde bereits angedeutet, daß mit wachsender Temperatur aus den exakten Ergebnissen der Transfermatrixmethode auf eine Abnahme der Solitonenenergie zu schließen ist. Die Ursache für diese, als thermische Renormierung der Solitonenenergie zu interpretierende Energieabnahme ist nun gerade darin zu suchen, daß als Folge der thermischen Fluktuationen die effektive Stärke des nichtlinearen Potentials geringer ist. Entsprechend der effektiven Abnahme des lokalen Potentials ist von einer Verbreiterung der Solitonenkonfiguration mit wachsender Temperatur auszugehen (Kapitel I 2.1). Während die Solitonenenergie in Form einer Aktivierungsenergie für die Interpretation experimenteller Daten zum dynamischen Strukturfaktor etc. wichtig ist, ist eine Verbreiterung der Solitonenkonfiguration in Molekulardynamik (MD) Simulationen direkt

beobachtbar. In Hinblick auf den Vergleich mit einer vorliegenden MD-Simulation steht deshalb im weiteren der Aspekt der Temperaturabhängigkeit der Solitonenbreite im Vordergrund. Die Möglichkeit eines Vergleichs zwischen Theorie und den Ergebnissen dieser MD-Simulation ist auch der Grund dafür, daß in diesem Abschnitt nicht die 1D Spinketten, sondern vielmehr das System einer Krypton-Monolage auf Graphit untersucht wird.

Fig. V.1 zeigt einen Ausschnitt aus der Oberflächenstruktur eines Graphitkristalls. Jede der vier dargestellten Einheitszellen ent-

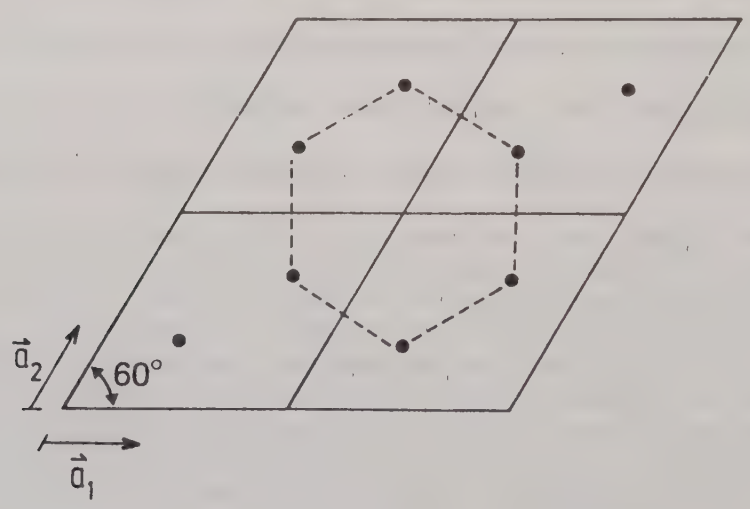


Fig. V.1 Atomare Struktur einer Graphit-Oberfläche. Gezeichnet sind vier Graphit-Einheitszellen mit je zwei C-Atomen Das Zentrum des gestrichelten Hexagons ist eine mögliche Adsorptionsstelle für Krypton.

hält zwei Kohlenstoffatome. Das Zentrum des in Fig. V.1 eingezeichneten Hexagons stellt die energetisch günstigste Position, die sogenannte Adsorptionsstelle, für ein auf der Graphitoberfläche adsorbiertes Edelgasatom dar. Als Gitter dieser möglichen Adsorptionsstellen kann man sich die gesamte Graphitoberfläche vorstellen (Fig. V.2). Die Graphitoberfläche vermittelt somit ein periodisch variierendes Substratpotential mit Minima bei den jeweiligen Adsorptions-

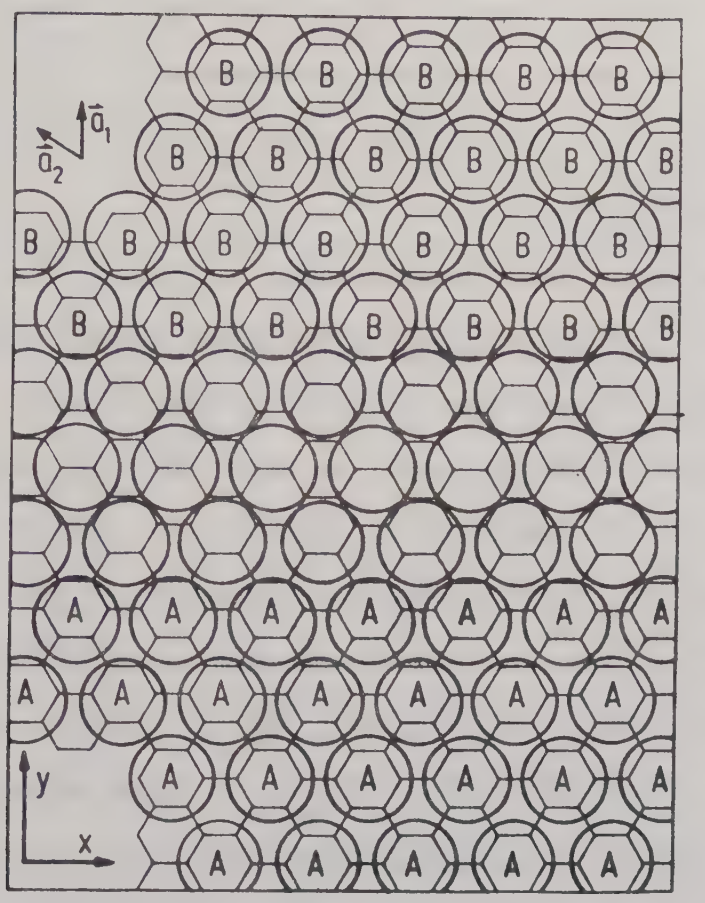


Fig. V.2 Gitter der möglichen Adsorptionsstellen (Zentren der Hexagone) auf einer Graphit-Oberfläche (vgl. Fig. V.1). Bei der kommensurablen Struktur von Krypton auf Graphit ist jede dritte mögliche Adsorptionsstelle besetzt. Daher existieren drei energetisch entartete kommensurable Konfigurationen. Zwei Beispiel (A) und (B) sind in der unteren und oberen Hälfte der Figur gezeigt. Dabei sind die Krypton-Atome durch Kreise symbolisiert. Zwischen den Bereichen A und B befindet sich eine inkommensurable Domänenwand. Ebenfalls eingezeichnet sind die Graphit-Gittervektoren $\vec{a}_1$ und $\vec{a}_2$ und das kartesische Koordinatensystem.

stellen. Für den festen Zustand eines adsorbierten Edelgasfilmes sind daher zwei konkurrierende Längen relevant. Die eine ist durch den Gleichgewichtsabstand der Edelgasatome als Folge ihrer gegenseitigen Wechselwirkung festgelegt, die andere ist durch den Abstand der Adsorptionsstellen bestimmt.

Bei der Verschiebung eines Edelgasatoms in der Filmebene ist die Variation des Edelgas/Graphit-Potentials sehr viel geringer als die Variation des Edelgas/Edelgas-Potentials (Steele 1973). Wenn die beiden entsprechenden Längen sehr unterschiedlich sind, wird deshalb die Edelgas/Edelgas-Wechselwirkung dominieren. Der Abstand der Edelgasatome ist dann mit dem Abstand der Adsorptionsstellen nicht verträglich und man spricht von einem inkommensurablen System. Wenn nun allerdings, wie im Falle von Krypton, die beiden Längeskalen nahezu miteinander verträglich sind, kann auch eine kommensurable Adsorptionsschicht auftreten. So ist der Krypton/Krypton-Gleichgewichtsabstand nur um ungefähr 5% kleiner als $\sqrt{3}$ - mal der Abstand zwischen zwei möglichen Adsorptionsstellen. Dreht man nun einen kristallinen Krypton-Film nicht zu hoher Dichte um 30° gegenüber der Grundlinie der Graphit-Einheitszelle, kann die Gesamtenergie des Systems dadurch verringert werden, daß der Krypton/Krypton-Abstand geringfügig vergrößert wird und alle Atome dafür Adsorptionsstellen einnehmen. Die mit A gekennzeichneten Plätze in Fig. V.2 stellen diese sogenannte $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ R30 - kommensurable Struktur dar. Deutlich wird an dieser Darstellung, daß im Fall einer kommensurablen Monolage nur jede dritte Adsorptionsstelle der Graphit-Oberfläche besetzt ist. Wird nun die Anzahl der Kryptonatome gegenüber diesem Fall vergrößert, so findet mit zunehmender Dichte ein Übergang zu einer inkommensurablen Phase statt, da nicht mehr alle Atome kommensurable Positionen einnehmen können. Schließlich wird der voll-

ständig inkommensurable Zustand erreicht, bei dem der Abstand der Atome unabhängig von der Graphitoberfläche allein durch die Krypton, Krypton-Wechselwirkung bestimmt wird.

Fig. V.3 zeigt das aus Messungen der spezifischen Wärme bestimmte Phasendiagramm von Birgeneau et al (1980) für Krypton auf Graphit.

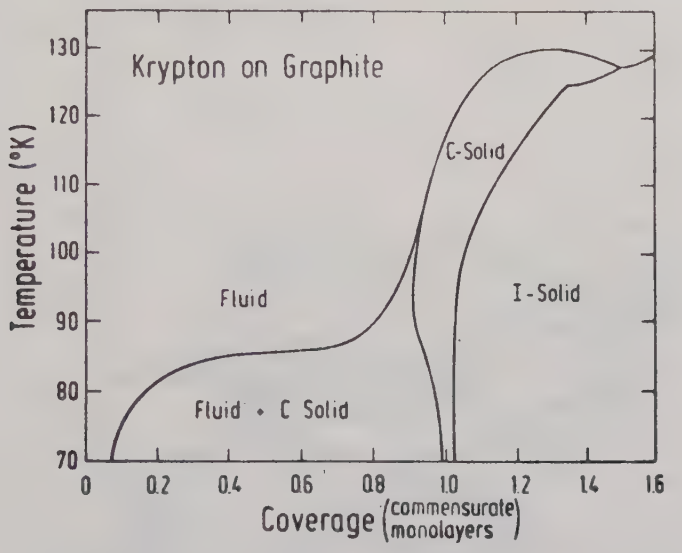


Fig. V.3 **Phasendiagramm von Krypton auf Graphit nach Birgeneau et al (1980). Die Werte für mehr als eine kommensurable Monolage Bedeckung sind aus experimentellen Daten extrapoliert.**

Obwohl verschiedene Details des Phasendiagramms nur Extrapolationen vorhandener Daten sind, reicht dieses Phasendiagramm für einen Überblick hier aus. Interessant ist im weiteren nur der Übergang vom kommensurablen zum inkommensurablen Festkörper. Moncton et al (1981) haben für diesen Fall hochaufgelöste Synchrotonstreuexperimente bei einer Bedeckung von etwa einer kommensurablen Monolage um 100 K ausgeführt und den kommensurabel/inkommensurabel Phasenübergang bei zunehmender Bedeckung beobachtet.

In Fig. V.4 ist die Halbwertsbreite des ersten Bragg-Reflexes im

statischen Strukturfaktor S(k) als Funktion der Position des Maximums k_{max} aufgetragen. Ein kristalliner Zustand ist im statischen Strukturfaktor durch eine geringe Halbwertsbreite des Bragg-Reflexes gekenn-

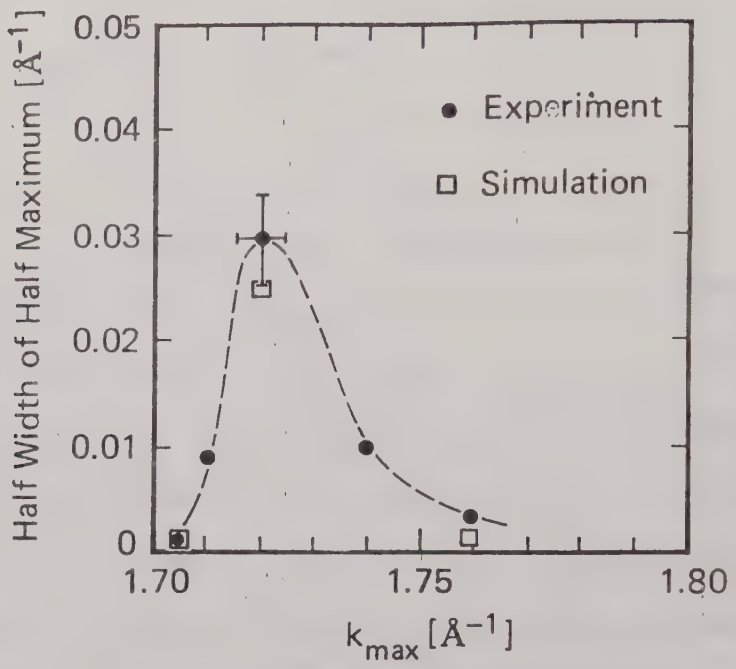


Fig. V.4 Halbwertsbreite bei halber Höhe des ersten Braggreflexes des atomaren Strukturfaktors von Krypton auf Graphit als Funktion der Position k_{max} des Maximums. (Aus: Abraham et al 1982)

zeichnet. Dieser Fall liegt bei der Bedeckung von genau einer kommensurablen Monolage vor. Der Übergang zu einer inkommensurablen Phase kommt nun in Fig. V.4 dadurch zum Ausdruck, daß nach einer Zunahme der Bedeckung und damit einer der Komprimierung entsprechenden Verschiebung von k_{max} zu größeren Werten wieder die für einen kristallinen Zustand typische geringe Halbwertsbreite zu beobachten ist. Der Übergang ist allerdings zunächst mit einer Verbreiterung des Bragg-Reflexes verbunden. Um die physikalische Bedeutung dieser Verbreiterung im Zwischenbereich, die sich aus dem Experiment allein nicht klären läßt, zu untersuchen, haben Abraham et al (1982) MD-Simulationen dieses kommensurabel/inkommensurabel Phasenübergangs

für das System Krypton auf Graphit durchgeführt. Dabei wird die Bewegung von 22 212 Kryptonatomen für eine Bedeckung von 1.05 kommensurable Monolagen bei einer Temperatur von 97.5 K simuliert. Stellt man nun nach willkürlich gewählten Zeitschritten von den berücksichtigten Atomen die als Punkt dar, die sich nicht an möglichen Adsorptionsstellen befinden, so erhält man eine Abfolge von Schnappschüssen für die Zeitentwicklung des Systems, von denen ein typisches Beispiel in Fig. V.5 gezeigt ist. Die Figur zeigt eine sogenannte

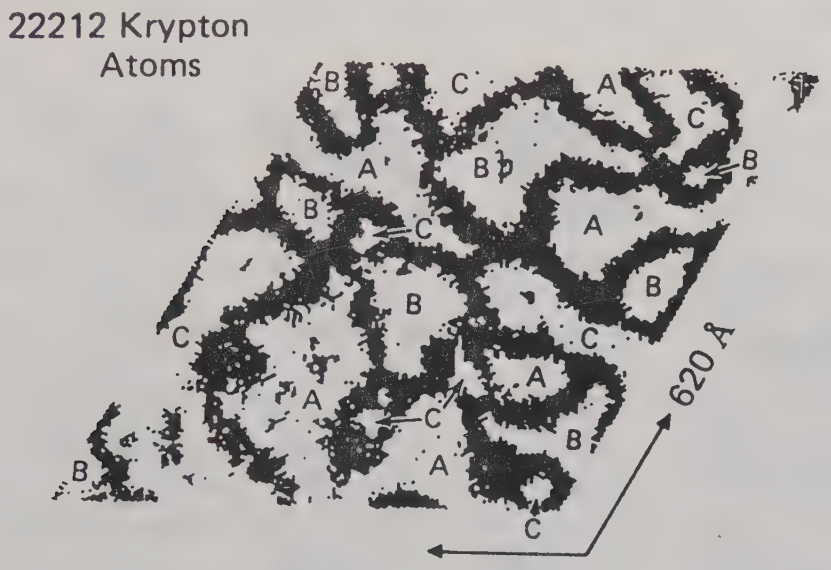


Fig. V.5 **Schnappschuß-Bild der inkommensurablen Krypton-Atome (44%) des 22 212 Atome-Systems Krypton auf Graphit bei einer Bedeckung von 1.05 kommensurablen Monolagen und der Temperatur T = 97.5 K. Die Untergitter der kommensurablen Krypton-Atome sind mit A,B,C gekennzeichnet (vgl. Fig. V.2). (Aus: Abraham et al 1982)**

"leicht inkommensurable" Phase, bei der kommensurable Bereiche durch ein Netzwerk von Domänenwänden bestehend aus inkommensurablen Atomen voneinander getrennt sind. Die in Fig. V.5 mit A, B, C bezeichneten kommensurablen Gebiete entsprechen den drei möglichen energetisch entarteten $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ R30 - kommensurablen Strukturen und sind jeweils inkommensurabel zueinander. Eine schematische Darstellung einer inkommensurablen Domänenwand, die die kommensurablen Regionen A und B verbindet, ist in Fig. V.2 gezeigt, wobei Kreise

Krypton-Atome symbolisieren. Nach diesem Ergebnis der MD-Simulation ist die Verbreiterung des Strukturfaktors (Fig. V.4) auf eine Beschränkung der interatomaren Korrelationslänge auf die Länge, die der typischen Größe der kommensurablen Bereiche entspricht, zurückzuführen.

Für eine theoretische Beschreibung der leicht inkommensurablen Phase ist nun von Bedeutung, daß die Dicke der Domänenwände im Laufe der Zeit bemerkenswert konstant ist. Dieser Sachverhalt ist in Fig. V.6 demonstriert. Dargestellt ist hier die dem in Fig. V.5 gezeigten

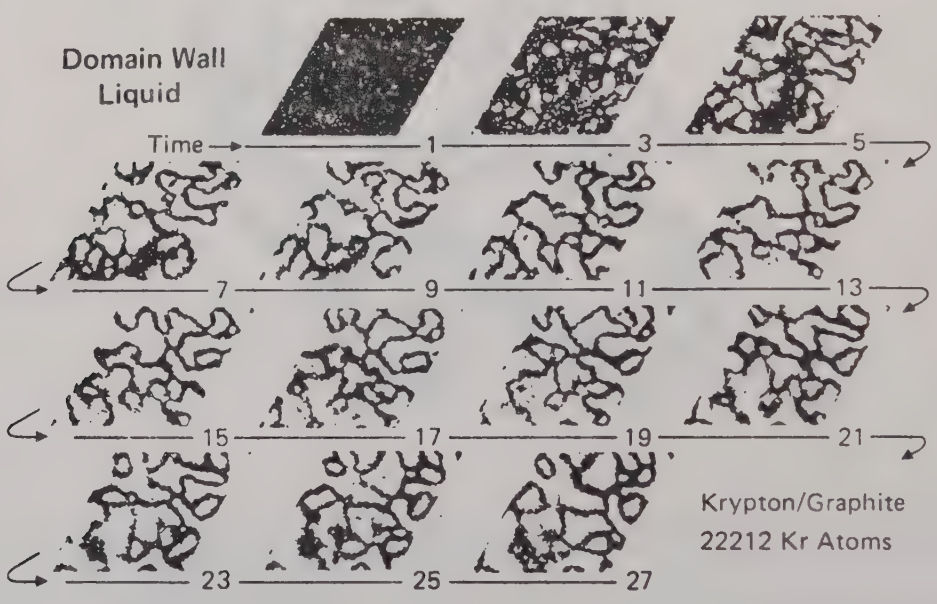


Fig. V.6 **Zeitentwicklung des leicht inkommensurablen Krypton/Graphit-System (vgl. Fig. V.5). Die Schnappschüsse zeigen die Bewegung der soliton-artigen inkommensurablen Domänenwände. Die Zeitschritte entsprechen 50 ps. (Aus: Koch und Abraham 1983)**

Beispiel entsprechende zeitliche Entwicklung des leicht inkommensurablen Systems, wobei als Startkonfiguration ein vollständig inkommensurables System (erstes Bild in Fig. V.6) gewählt ist. Nach

der anfänglich zu beobachtenden allmählichen Ausbildung von kommensurablen Bereichen, bis sich der Prozentsatz des Anteils kommensurabler Bereiche stabilisiert hat, zeigt sich in den atomaren Konfigurationen nur noch das Netzwerk der auf der Graphitoberfläche umherdiffundierenden inkommensurablen Domänenwände. Die gute Übereinstimmung der Ergebnisse von Experiment und Simulation (vgl. Fig. V.4) rechtfertigt die Annahme, daß die wesentlichen Wechselwirkungen in der MD-Simulation berücksichtigt sind. In diesem Abschnitt wird deshalb zunächst gezeigt (Schöbinger und Koch 1983), wie aus den entsprechenden Modellparametern der Simulation ein theoretisches Modell für die leicht inkommensurable Phase gewonnen werden kann. Im Rahmen dieses Modells lassen sich die Domänenwände durch ein effektiv eindimensionales SG-Modell beschreiben. Damit ist ähnlich wie im Fall der Blochwände (Kapitel I 3) der Anschluß an die Solitonentheorie hergestellt. Für das hier betrachtete System bei Temperaturen um 100 K sind dabei sicherlich die eingangs dieses Abschnitts erwähnten Einflüsse thermischer Fluktuationen wichtig. In diesem Abschnitt wird schließlich die Temperaturabhängigkeit der Solitonenbreite berechnet. Es zeigt sich, daß das Ergebnis in guter Übereinstimmung mit dem Resultat der MD-Simulation ist.

V 1 Das Modellsystem

In Übereinstimmung mit den Annahmen bei der MD-Simulation von Abraham et al (1982) wird die Van der Waals-Wechselwirkung zwischen den verschiedenen Atomen des Krypton/Graphit-Systems durch das Lennard-Jones 12:6 Paar-Potential

$$\varphi(r_{ij}) = 4\varepsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}\right) \qquad \text{V.1}$$

($r_{ij}=|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$) beschrieben, wobei $\vec{r}_i$, $\vec{r}_j$ die Positionen der Atome bezeichnen. Für die empirisch bestimmten interatomaren Parameter wird $\varepsilon_{Kr}/k_B = 170K$, $\sigma_{Kr} = 3.6$ Å im Falle der Krypton/Krypton-Wechselwirkung bzw. $\varepsilon_{Kr-C}/k_B = 66.6K$, $\sigma_{Kr-C} = 3.35$ Å im Falle der Krypton/Graphit-Wechselwirkung verwendet. Unter der Annahme, daß sich die Wechselwirkungen paarweise addieren lassen, ist die gesamte potentielle Energie von N Kryptonatomen über einem halbunendlichen, starren Graphit-Kristall mit Gitterplätzen $\vec{X}_i$ gegeben durch

$$U = U_{Kr} + U_S \ ,$$

wobei

$$U_{Kr} = \sum_{i>j} \varphi_{Kr}(r_{ij}) \qquad \text{V.2a}$$

und

$$U_S = \sum_{i\{Kr\}} \sum_{j\{C\}} \varphi_{Kr-C}(|\vec{r}_i - \vec{X}_j|) \ . \qquad \text{V.2b}$$

Die Annahme eines starren Graphit-Kristalls, die ebenfalls bei der MD-Simulation verwendet wurde (Abraham et al 1982), rechtfertigt sich aus der Tatsache, daß das Graphit-Gitter deutlich steifer als der adsorbierte Edelgas-Film ist. Steele (1973) hat nun gezeigt, daß das Substrat-Potential U_S analytisch als Fourier-Reihe in den Ortsvariablen der Ebene parallel zur Graphit-Oberfläche ausgedrückt werden kann. Diese Reihe konvergiert sehr schnell und der Term zweiter Ordnung ist bereits um zwei Größenordnungen kleiner als der Term erster Ordnung. Für die vorliegenden Untersuchungen ist es deshalb gerechtfertigt, sich auf die führende Ordnung im Potential zu beschränken. In dieser Näherung kann das Potential in der Form

$$U_S = \sum_{i=1}^{N} \{E_o(z_i) + E_1(z_i)\, f_1(\xi_{1i}, \xi_{2i})\} \qquad V.3$$

mit

$$f_1(\xi_1, \xi_2) = -2\{\cos 2\pi\xi_1 + \cos 2\pi\xi_2 + \cos 2\pi(\xi_1+\xi_2)\} \qquad V.4$$

geschrieben werden. z bezeichnet hier den Abstand eines Kryptonatoms von der Graphit-Oberfläche und ξ_1, ξ_2 sind die Komponenten des Ortsvektors parallel zu dieser Oberfläche in der durch die Gittervektoren $\vec{a}_1$ und $\vec{a}_2$ des Graphit-Gitters gebildeten Basis (siehe Fig. V.1, V.2). Explizite Ausdrücke für $E_o(z)$ und $E_1(z)$ sind bei Steele (1973; Gln. 2.34,2.35) angegeben. Hier ist nur wichtig, daß das Minimum von U_S bezüglich z die Position z_{min} der ersten Adsorptionsschicht definiert. Diese Adsorptionsschicht hat eine endliche Dicke Δz. Die MD-Simulation (Abraham et al 1982) zeigt jedoch, daß Δz sehr viel kleiner als der mittlere Krypton/Krypton-Abstand ist. Deshalb kann $\Delta z \approx 0$ und damit ein effektiv zweidimensionales System angenommen werden. Entsprechend werden für die weiteren Betrachtungen $E_o(z)$ und $E_1(z)$ an der Stelle $z = z_{min}$ berechnet.

Um die Eigenschaften der leicht inkommensurablen Phase von Krypton auf Graphit bei endlicher Temperatur zu behandeln, ist zunächst die Gitterdynamik des Krypton-Festkörpers zu betrachten. Als Ausgangspunkt wird ein vollständig kommensurables Dreiecksgitter mit Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen gewählt. Die Kraftkonstante zwischen nächsten Nachbarn ist durch $f = d^2\varphi/d\,r_{ij}^{\,2}$ mit φ aus Gleichung V.1 definiert. Beschränkt man sich auf die harmonische Näherung, so findet man, daß die Schwingungen der Atome aus der Adsorptionsschicht heraus - die den Charakter von Einsteinoszillatoren haben - vollständig von den Schwingungen in der Adsorptionsschicht entkoppelt sind. Dieses Resultat ist konsistent mit der Beschränkung auf ein zweidimensionales

Modellsystem.

Die x- und y-Achse sind so gewählt (Fig. V.2), daß die Gittervektore des kommensurablen Dreiecksgitters durch $\vec{b}_1 = b(1,0)$ und $\vec{b}_2 = \frac{b}{2}(1, \sqrt{3})$ gegeben sind. $b = 4.26$ Å ist die Gitterkonstante der $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ R30 - kommensurablen Struktur und $b/\sqrt{3} \equiv a_1 = 2.46$ Å ist der Abstand zwischen den möglichen Adsorptionsstellen. In diesen Gittervektoren ist die Gleichgewichtsposition eines Atoms durch

$$\vec{R}_{\ell m} = m\vec{b}_1 + \ell\vec{b}_2 \qquad (\ell,m = 0, \pm1, \pm2, \ldots)$$

gegeben. Der Ortsvektor $\vec{r} = \xi_1\vec{a}_1 + \xi_2\vec{a}_2$ in der durch die Graphit-Gittervektoren gebildeten Basis (vgl. Gl. V.3) kann in kartesischen Koordinaten ausgedrückt werden mittels der Transformation $\hat{B}$

$$\vec{R} = \hat{B}\vec{r} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 1 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \vec{r} \quad .$$

Der Modell-Hamiltonian wird schließlich in kartesischen Koordinaten durch Auslenkungen $\vec{s}_{\ell m}$ aus der Gleichgewichtslage ausgedrückt. Es ist zweckmäßig, im folgenden zu skalierten Größen $\tilde{\vec{s}} = \frac{\vec{s}}{b\tilde{g}}$ überzugehen, wobei $\tilde{g}$ weiter unten definiert wird. Der Modell-Hamiltonian hat dann die Form:

$$H = E_o \{ \sum_{\ell m} \frac{1}{2}\dot{\vec{s}}_{\ell m}^{\,2} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell m i \\ \ell' m' i'}} \Phi^{\ell' m' i'}_{\ell m i} \, s_{\ell m i} \, s_{\ell' m' i'}$$
$$+ \frac{\omega_o^2}{2g^2} \sum_{\ell m} \left(3 - \cos(g\tilde{s}_{\ell m1}) - \cos(g\tilde{s}_{\ell m2}) - \cos(g(\tilde{s}_{\ell m1}+\tilde{s}_{\ell m2}))\right)\} . \qquad \text{V.4}$$

Während der erste Term die kinetische Energie beschreibt, folgen der zweite und der dritte Term aus der Krypton/Krypton-Wechselwirkung (Gl. V.2a) bzw. der Krypton/Graphit-Wechselwirkung (Gl. V.3). In Gleichung V.4 ist die Grundzustandsenergie bereits abgezogen. Die

Zeit ist in Einheiten von $\hbar/E_o$ gegeben, wobei $E_o = \hbar c_\ell / b$ eine modellabhängige Energieskala festlegt. Unter Vorgriff auf Kapitel V 2 bezeichnet $c_\ell = \left(\frac{9fb^2}{8M}\right)^{1/2}$ (M ist die Masse eines Krypton-Atoms) die longitudinale Schallgeschwindigkeit des Phononenspektrums. Die Kraftkonstanten

$$\Phi^{\ell' m' i'}_{\ell m i} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial R_{\ell m i} \, \partial R_{\ell' m' i'}} \frac{\hbar^2}{E_o^2 M}$$

sind proportional zur Kraftkonstanten zwischen nächsten Nachbarn f, die in den obigen Einheiten durch $\tilde{f} = \frac{\hbar^2 f}{E_o^2 M} = \frac{8}{9}$ gegeben ist. Die explizite Abhängigkeit dieser Kraftkonstanten von der Gittersymmetrie ist an dieser Stelle nicht wichtig, da für die Bestimmung der Phononendispersion nur die dynamische Matrix

$$D_{o\,i}^{\,i'}(\vec{q}) = \sum_{\ell' m'} \Phi^{\ell' m' i'}_{\ell m i} \, e^{i\vec{q}(\vec{R}_{\ell m} - \vec{R}_{\ell' m'})}$$

von Bedeutung ist. Die dynamische Matrix wird in Kapitel V 2 angegeben. Die Größe $\omega_o^2 = \alpha^2 \frac{4}{9} \frac{\rho \, \varepsilon_{Kr\text{-}C}}{f b^2}$ mit $\frac{\rho \, \varepsilon_{Kr\text{-}C}}{8} \equiv E_1(z_{min})$ (vgl. Gl. V.3) ist ein Maß für die Tiefe des Substratpotentials. $\alpha = 2\pi\sqrt{3}$ ist ein geometrischer Faktor, der die Längenskala des Substratpotentials in Einheiten der Gitterkonstante b angibt. Für ρ ehält man nach Steele (1973) den Wert $\rho = 0.692$. Die Größen $\tilde{s}_1$, $\tilde{s}_2$ und $\tilde{s}_1 + \tilde{s}_2$ bezeichnen ursprünglich die Komponenten der Abweichungen von der Gleichgewichtslage in der Basis $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ und sind hier als Funktionen der kartesischen Komponenten $s_{\ell mx}$, $s_{\ell my}$ aufzufassen. Dieser Zusammenhang ergibt sich aus der Transformationsmatrix $\hat{B}^{-1}$.

Die formal eingeführte Größe $g^2 = \alpha^2 \tilde{g}^2 = \alpha^2 \hbar / M c_\ell \, b$ ist ein Maß für die Kopplung zwischen den Gitterschwingungen als Folge der Nichtlinearität des Substratpotentials. Diese Kopplungskonstante ist ein geeigneter Entwicklungsparameter für die Auswertung der thermodynamischen Eigenschaften des nichtlinearen Hamiltonian Gl. V.4. Es stellt sich nun heraus, daß als Folge der Proportionalität zwischen

g^2 und der inversen Masse M^{-1} der numerische Wert der Kopplungsstärke für das Krypton-System sehr klein ist. Deshalb kann man sich im Rahmen einer störungstheoretischen Behandlung auf die niedrigste Ordnung beschränken und die thermodynamischen Erwartungswerte mit harmonischen, wechselwirkungsfreien Phononen auswerten ("Gauß'sche Näherung"). Am Beispiel der SG-Theorie hat Coleman (1977) gezeigt, daß g^2 gleichzeitig auch ein Maß für den Quantencharakter des Systems ist. Einer inkommensurablen Domänenwand, wie sie beispielsweise in Fig. V.2 veranschaulicht ist, entspricht im Rahmen einer quantenmechanischen Beschreibung eine kohärente Überlagerung von Gitterschwingungen dergestalt, daß der quantenmechanische Erwartungswert des Operators $\vec{S}$ gebildet mit einem solchen "kohärenten Zustand" gerade der in der Figur gezeigten klassischen Konfiguration entspricht. Zu einer quasi-klassischen Behandlung eines Quantensystems, wie es zunächst einmal der Krypton-Festkörper (Gl. V.4) darstellt, kann man im allgemeinen dann übergehen, wenn ein anfänglich kohärenter Zustand für alle Zeiten ein kohärenter Zustand bleibt (Glauber 1966, Metha und Sudarshan 1966). Deutlich wird jedoch an Gl. V.4, daß die zeitliche Invarianz eines solchen kohärenten Zustandes nur im Limes $g^2 \to 0$ gewährleistet ist. In diesem Sinne ist die Möglichkeit einer quasi-klassischen Beschreibung auf den Fall schwach gekoppelter nichtlinearer Systeme beschränkt. Der bereits angesprochene Zusammenhang zwischen Kopplungskonstante und inverser Masse und der daraus resultierende geringe Wert der Kopplungskonstante für Krypton ist der Grund dafür, daß im Krypton-Festkörper in Gegensatz beispielsweise zu einem System aus vergleichsweise leichten Helium-Atomen Quanteneffekte nur von untergeordneter Bedeutung sind. Gleichzeitig ist damit aber auch eine MD-Simulation des Krypton-Systems im Rahmen klassischer Bewegungsgleichungen gerechtfertigt. In dem vorliegenden Ab-

schnitt besteht nun das Vorgehen darin, das mikroskopische Quantensytem konsistent zu behandeln und abschließend zu zeigen, daß Quanteneffekte wirklich keine Rolle spielen. Es sei schon an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß der Beitrag der Nullpunkts-Bewegung der Atome zur mittleren quadratischen Abweichung $\langle \vec{S}_{\ell m}^{\,2} \rangle = b^2 \tilde{g}^2 \langle \vec{s}_{\ell m}^{\,2} \rangle$ von der Ordnung $O(g^2)$ und damit vernachlässigbar ist. Demgegenüber schließt jedoch eine kleine Kopplungskonstante deutliche thermische Renormierungen bei hohen Temperaturen nicht aus. Nach dem klassischen Gleichverteilungssatz ist in diesem Temperaturregime vielmehr ein von g^2 und damit auch von ~~n~~ und M unabhängiges Resultat für $\langle \vec{S}_{\ell m}^{\,2} \rangle$ zu erwarten.

Zum Vergleich sei abschließend erwähnt, daß in 1D Spinketten größere Kopplungsstärken auftreten ($CsNiF_3$: $g^2 \approx 0.6$; TMMC: $g^2 \approx 1.2$; Maki 1982) und damit in diesen Systemen Quanteneffekte wichtig sind. In diesem Zusammenhang steht auch die am Ende von Kapitel II 5 erwähnte, noch ungeklärte Kontroverse hinsichtlich der Ergebnisse für die Renormierung der Solitonenenergie in $CsNiF_3$, bei der sich klassische und quatenmechanische Beschreibungen gegenüberstehen.

V 2 Harmonische Phononen

In niedrigster Ordnung in der Kopplungsstärke (d.h. $O(1)$) ergibt sich aus Gl. V.4 ein System wechselwirkungsfreier, harmonischer Phononen. Unter der Annahme periodischer Randbedingungen (Born-von Kármán Randbedingungen) ergeben sich die Eigenfrequenzen und Eigenvektoren aus der charakteristischen Gleichung

$$\omega^{(j)2}(\vec{q})\ \vec{e}^{(j)}(\vec{q}) = \hat{D}(\vec{q})\ \vec{e}^{(j)}(\vec{q}) \quad , \qquad \text{V.5}$$

wobei die dynamische Matrix $\hat{D} = \hat{D}_o + \hat{D}_1$ gegeben ist durch

$$\hat{D}_o(\vec{q}) = \frac{8}{9}\begin{pmatrix} 3 - \cos(b\,q_x) - \cos\left(\frac{b\,q_x}{2}\right)\cos\left(\frac{b\sqrt{3}q_y}{2}\right) & \sqrt{3}\sin\left(\frac{bq_x}{2}\right)\sin\left(\frac{b\sqrt{3}q_y}{2}\right) \\ \sqrt{3}\sin\left(\frac{bq_x}{2}\right)\sin\left(\frac{b\sqrt{3}q_y}{2}\right) & 3\left(1 - \cos\left(\frac{bq_x}{2}\right)\cos\left(\frac{b\sqrt{3}q_y}{2}\right)\right) \end{pmatrix}$$

V.5a

und

$$\hat{D}_o = \omega_o^2\,\hat{1} \quad . \qquad \text{V.5b}$$

$\hat{D}_o$ ist die dynamische Matrix für das aus Krypton-Atomen bestehende ungestörte, zweidimensionale Dreiecksgitters. Aus Gl. V.5b ist zu entnehmen, daß sich das Substrat in niedrigster Ordnung nur in Form eines statischen äußeren Feldes bemerkbar macht. Dieses auf die Krypton/Graphit-Wechselwirkung zurückgehende äußere Feld bricht die kontinuierliche Translationssymmetrie und das Verschwinden der Goldstone-Mode macht sich in Form einer Lücke im Phononenspektrum bemerkbar. Die Phononendispersion des zweidimensionalen Krypton-Gitters ist in Fig. V.7 für Hauptsymmetrierichtungen des reziproken Gitters gezeigt. Mit dem entsprechenden Wert $f\,b^2 = 21.46\,\varepsilon_{Kr}$ ergibt sich $\omega_o^2 = 0.66$. Zum Vergleich enthält Fig. V.7 auch die Dispersionskurven für den zweidimensionalen Krypton-Kristall ohne Substratpotential. Die Steigung der longitudinalen Zweige im Limes $\vec{q} \to 0$ ist in diesem Fall gerade durch die bereits in Kapitel V 1 eingeführte longitudinale Schallgeschwindigkeit $c_\ell = (9fb^2/8M)^{1/2}$ gegeben. Mit der Krypton-Masse M = 84 amu ergibt sich für die Energieeinheit $E_o/k_B = 11.38\,K$. Man findet damit eine deutliche Lücke der Größenordnung $\omega_o E_o/k_B \approx 10\,K$ für das Phononenspektrum des kommensurablen Festkörpers. Das Maximum der Dispersion ist von der Größenordnung 30 K . Daraus folgt, daß für die interessierenden hohen Temperaturen die vollständige Phononendispersion zu berücksichtigen ist.

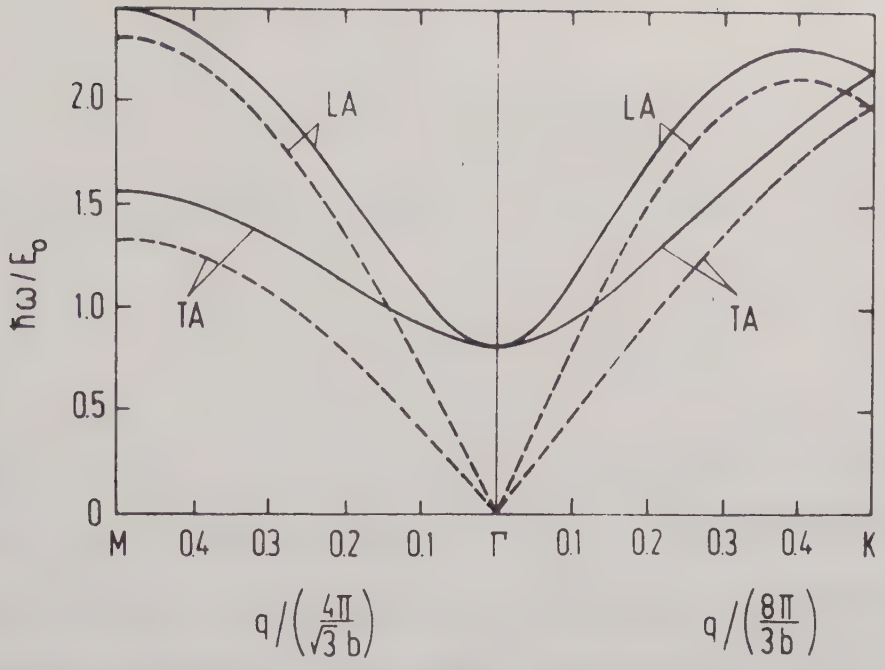


Fig. V.7 **Phononendispersion des zweidimensionalen Krypton-Gitters unter Berücksichtigung der Kopplung an das Graphit-Substrat (————) sowie für das isolierte Krypton-Gitter (-------). Der Berechnung liegt die Annahme einer harmonischen Nächst-Nachbar-Kopplung zugrunde. (Aus: Schöbinger und Koch 1983)**

Abschließend sei darauf hingewiesen, daß aus den in diesem Kapitel angegebenen Modellparametern ein Wert $g^2 = 0.328$ für die Kopplungsstärke folgt. Damit ist, wie bereits in Kapitel V 1 erwähnt wurde, die Kopplungsstärke für das Krypton-System klein gegen 1.

V 3 Der Variationsansatz

Um thermische Effekte selbstkonsistent zu behandeln, wird ein Variationsansatz für das Modellsystem eingeführt. Verwendet wird

dazu die Bogoljubov-Ungleichung für die Freie Energie F. Definitionsgemäß gilt

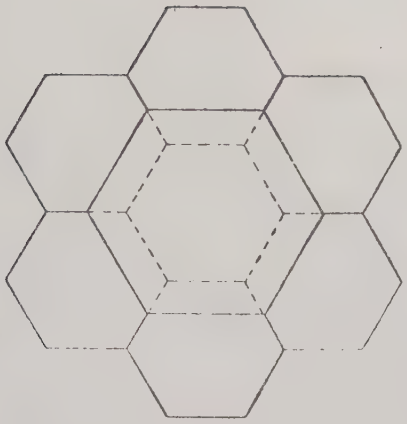
$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \qquad \text{V.6}$$

mit $Z = \text{Spur}\, e^{-\beta H}$ und $\beta = 1/k_B T$. Die Bogoljubov-Ungleichung hat die Form

$$F \leq F_o \equiv F_T + \langle H - H_T \rangle_T \quad , \qquad \text{V.7}$$

wobei F_T durch V.6 mit dem Test-Hamiltonian H_T anstelle von H gegeben ist. Der Mittelwert $\langle \ldots\ldots \rangle_T$ bezieht sich auf die thermische Mittelung bezüglich H_T. Da nun die Eigenschaften der inkommensurablen Domänenwände interessieren, wird der Test-Hamiltonian so gewählt daß er diese Eigenschaften berücksichtigt und Phononen in Anwesenheit von Domänenwänden beschreibt.

Eine Analyse der Daten der MD-Simulation von Abraham et al (1982) ergibt, daß man die Orientierung der Domänenwände in guter Näherung den drei äquivalenten, durch die hexagonale Symmetrie des Substrats festgelegten Hauptsymmetrierichtungen $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$, $\vec{b}_2 - \vec{b}_1$ (vgl. Kapitel V 1) zuordnen kann. Dies führt zur Bildung eines "Honigwaben-Netzwerkes" von inkommensurablen Wänden. Ein Spezialfall ist die Anordnung der Wände in Form eines regelmäßigen, hexagonalen Honigwaben-Netzwerkes. Villain (1980) hat nun gezeigt, daß eine solche regelmäßige Anordnung energetisch entartet ist mit dem Fall, bei dem einzelne Hexagone ausgedehnt oder kontrahiert sind, wie es in der folgenden Skizze angedeutet ist. Dieses Ergebnis ist eine Konsequenz der Tatsache, daß die Energie des Netzwerkes aus Domänenwänden durch die Gesamtlänge der Wände und die Gesamtzahl ihrer gegenseitigen Schnittpunkte bestimmt ist, die beide durch die beschriebene Modifikation der Anordnung nicht geändert werden. Huse und Fisher (1982)



haben kürzlich gezeigt, daß es zwei unterschiedliche Wandtypen gibt, die durch ihre Gitterorientierung bestimmt sind und als "schwere" bzw. "leichte" Wand bezeichnet werden. Solange die Abfolge kommensurabler Bereiche im gesamten Kristall einheitlich ist, tritt nur ein Wandtyp auf (z.B. schwere Wände für die Abfolge ACBACB entlang der Richtung $\vec{a}_1$). Einbeziehung von Versetzungen in ein solches Netzwerk, wie es z.B. von Coppersmith et al (1982) in deren Fig.7 veranschaulicht ist, erklärt das Auftreten unterschiedlicher Wandtypen (z.B.: BCB repräsentiert eine leichte Wand gefolgt von einer schweren). Aus der Verteilung der kommensurablen Bereiche, die aus der Simulation (Abraham et al 1982) folgt, ist zu schließen, daß gerade der Fall mit beiden Wandtypen realisiert ist. Dieses Ergebnis ist ein Hinweis darauf, daß Versetzungen im Honigwaben-Netzwerk bei endlichen Temperaturen existieren. Insgesamt legen die Schnappschuß-Bilder (Fign. V.5, V.6) sowie die beobachtete große Mobilität der Domänenwände (Abraham et al 1982) es nahe, daß ein unregelmäßiges Honigwaben-Netzwerk unter Einschluß von Versetzungen (Coppersmith et al 1982) die richtige Beschreibung für die leicht inkommensurable Phase liefert.

Da die Ergebnisse der MD-Simulation keine Unterschiede für die Breite von leichten und schweren Wänden erkennen lassen, erscheint es in einem ersten Schritt sinnvoll, die vorliegenden Betrachtungen auf den Fall von schweren Wänden zu beschränken. Eine solche schwere Wand ist in Fig. V.2 skizziert. Aus der MD-Simulation (Abraham et al 1982) sind nun weitere für die Behandlung thermischer Effekte wichtige Eigenschaften des Systems zu entnehmen. So zeigen die inkommensurablen Domänenwände keine starken Fluktuationen, obwohl die einzelnen Krypton-Atome deutlich um ihre mittlere Lage fluktuieren. In erster Näherung bleibt die Form der Domänenwände im Laufe der Zeit invariant und das entsprechende Netzwerk aus diesen Wänden diffundiert langsam durch das System. Zusätzlich sind zwar langsame Änderungen von Größe und Form der kommensurablen Bereiche zu beobachten, ohne daß sich dabei jedoch die Gesamtstruktur des Netzwerkes ändert. Schließlich ist für den größten Teil der kommensurablen Bereiche die Annahme einer großen Ausdehnung für beliebige Zeiten gerechtfertigt. Man kann sich deshalb die Wände aus ebenen Segmenten zusammengesetzt denken, die entlang der Hauptsymmetrierichtungen der Graphit-Oberfläche orientiert sind. Deshalb erscheint es sinnvoll, bei der Untersuchung des Einflusses thermischer Fluktuationen von einer statischen, ebenen Wand auszugehen. Man beachte, daß zumindest in erster Näherung die Annahme ebener Wandsegmente unabhängig davon sein sollte, ob Versetzungen existieren oder nicht (vgl. Fign. 7 und 8 bei Coppersmith et al 1982).

Die Anzahl der Domänenwände des Systems ist durch die Anzahl der Krypton-Atome festgelegt, die zu einer Bedeckung größer als eine kommensurable Monolage führen. Da es keinen thermischen Erzeugungsmechanismus für Domänenwände gibt, besteht der gesamte Temperatureffekt in einer Modifikation der Wandkonfiguration, speziell in

einer Zunahme der Wandbreite, die im Rahmen der geschilderten Annahmen selbstkonsistent berechnet wird.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird eine Wand parallel zu $\vec{b}_1$ betrachtet. Die mittlere Abweichung eines Atoms von seiner kommensurablen Lage kann dann durch einen Vektor $\vec{s}^W_{\ell m}$, der nur eine Komponente in $\vec{e}_y$-Richtung hat, beschrieben werden, d.h. $\vec{s}^W_{\ell m} = (0, s(\ell))$. Wie bei Blochwänden (Kapitel I 3) ist damit durch die Annahme einer ebenen Wandkonfiguration der Anschluß an eine effektiv eindimensionale Beschreibung hergestellt, die im vorliegenden Zusammenhang auch unter dem Stichwort "Frank und van der Merwe-Theorie" bekannt ist (Frank und van der Merwe 1949).

Die Differenzen zwischen der momentanen und der mittleren atomaren Position $\vec{s}_{\ell m} - \vec{s}^W_{\ell m}$ kann durch Boseoperatoren a, $a^\dagger$ ausgedrückt werden:

$$s_{\ell mi} - s^W_{\ell mi} = N^{-1/2} \sum_{\vec{q},j} \left(\frac{1}{\omega^{(j)}(\vec{q})}\right)^{1/2} e_i^{(j)}(\vec{q})\, e^{i\vec{q}\vec{R}_{\ell m}} \left(a^{(j)\dagger}_{\vec{q}} + a^{(j)}_{\vec{q}}\right) .$$

Mit einem Test-Hamiltonian der Form

$$H_T = \sum_{\vec{q},j} \omega^{(j)}(\vec{q}) \left(a^{(j)\dagger}_{\vec{q}}\, a^{(j)}_{\vec{q}} + \frac{1}{2}\right) \qquad \text{V.8}$$

ergibt sich dann gerade $\langle s_{\ell mi} \rangle_T = s(\ell)\, \delta_{iy}$. Mit diesem Hamiltonian bestimmt sich die Phononendispersion $\omega^{(j)}(\vec{q})$ in Anwesenheit einer Domänenwand, sowie die Konfiguration $s(\ell)$ dieser Domänenwand aus der Minimalisierung von F_o (Gl. V.7) bezüglich $\omega^{(j)}(\vec{q})$ und $s(\ell)$.

Der obige Variationsansatz wurde im Fall eines Rechtecksgitters von Saito (1980) verwendet. Im Gegensatz zum Rechtecksgitter sind die Auslenkungen in x- und y-Richtung bei hexagonaler Symmetrie jedoch gekoppelt und die Details der Rechnung unterscheiden sich wesentlich von denen bei Saito.

V 4 Auswertung des Variationsansatzes

Mit H_T aus Gleichung V.8 folgt für die Freie Energie F_o (Gl. V.7)

$$F_o = F_T + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q},j} \omega^{(j)}(\vec{q}) \left\{ \frac{\sum_{i,i'} e_{i'}^{(j)}(\vec{q})\, D_o{}_i^{i'}(\vec{q})\, e_i^{(j)}(\vec{q})}{\omega^{(j)}(\vec{q})^2} - 1 \right\} \frac{\partial F_T}{\partial \omega^{(j)}(\vec{q})}$$

$$+ \frac{3\gamma}{4f} \sum_{\ell,m} \left\{ 2\,s(\ell)^2 - s(\ell+1)s(\ell) - s(\ell)s(\ell-1) \right\}$$

$$+ \frac{\omega_o^2}{2g^2} \sum_{\ell,m} \left\{ 3 - (\gamma_1+\gamma_2)\cos\left(g\,s(\ell)\right) - \gamma_2 \right\} \qquad \text{V.9a}$$

mit

$$F_T = \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{q},j} \left\{ \log\left(1 - e^{-\beta\omega^{(j)}(\vec{q})}\right) \right\} + \sum_{\vec{q},j} \frac{\omega^{(j)}(q)}{2} \quad ; \qquad \text{V.9b}$$

$\hat{D}_o(\vec{q})$ ist die in Gl. V.5a angegebene dynamische Matrix der ungestörten Phononen und $\vec{e}^{(j)}(\vec{q})$ bezeichnet den Polarisationsvektor der dazugehörigen Dispersion $\omega^{(j)}(\vec{q})$. Aus Gleichung V.9b ist zu entnehmen, daß

$$\frac{\partial F_T}{\partial \omega^{(j)}(q)} = n\left(\omega^{(j)}(\vec{q})\right) + \frac{1}{2} \quad ,$$

wobei $n(E) = (e^{\beta E} - 1)^{-1}$ die Boseverteilungsfunktion ist. Die γ_i in Gl. V.9a sind gegeben durch

$$\gamma_i = e^{-\frac{g^2}{2}\Delta_i}$$

mit

$$\Delta_i = \langle (\eta_{i1} s_{\ell mx} + \eta_{i2} s_{\ell my})^2 \rangle_T \quad , \quad i=1,2,3.$$

Diese Größen sind das Ergebnis der Gauß'schen Näherung des nichtlinearen Terms in Gl. V.4 als Folge der thermischen Mittelung bezüglich H_T. Die Koeffizientenmatrix $\hat{\eta}$ ist durch

$$\eta_{ij} = B_{ij}^{-1} \quad i,j=1,2$$

und

$$\eta_{3j} = \eta_{1j} + \eta_{2j}$$

gegeben und resultiert aus dem in Kapitel V 1 angesprochenen Zusammenhang zwischen $\tilde{s}_1$, $\tilde{s}_2$ sowie $\tilde{s}_1 + \tilde{s}_2$ und den kartesischen Komponenten $s_{\ell mi}$ der Auslenkungen. Da der nichtlineare Term nur von Auslenkungen in die Richtungen $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_1 + \vec{a}_2$ abhängt, enthalten die Δ_i's jeweils nur Gitterschwingungen entsprechend einer dieser Richtungen.

Minimalisierung von F_o (Gl. V.9) bezüglich $\omega^{(j)}(\vec{q})$ und $s(\ell)$ führt auf die Gleichungen

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\delta F_o}{\delta s(\ell)} = -\frac{3\tilde{f}}{2}\left\{s(\ell+1) + s(\ell-1) - 2s(\ell)\right\} + \frac{\omega_o^2}{g}\,\frac{\gamma_1+\gamma_3}{2}\,\sin\left(g\,s(\ell)\right) \qquad V.10$$

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\delta F_o}{\delta \omega^{(j)}(\vec{q})} = \left\{\omega^{(j)}(\vec{q})^2 - \sum_{i,i'} e_{i'}^{(j)}(\vec{q})\,(D_o{}_i^{i'}(\vec{q}) + A_i^{i'})\,e_i^{(j)}(\vec{q})\right\} . \qquad V.11$$

Dabei ist $\hat{A}$ durch

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \frac{\tilde{\gamma}_1 + \tilde{\gamma}_3}{2} & \frac{\tilde{\gamma}_3 - \tilde{\gamma}_1}{\sqrt{3}} \\ \frac{\tilde{\gamma}_3 - \tilde{\gamma}_1}{\sqrt{3}} & \frac{\tilde{\gamma}_1 + \tilde{\gamma}_3 + 4\tilde{\gamma}_2}{6} \end{pmatrix}$$

mit

$$\tilde{\gamma}_1 = \gamma_1 \frac{1}{N} \sum_{\ell m} \cos\left(g\,s(\ell)\right)$$

$$\tilde{\gamma}_3 = \gamma_3 \frac{1}{N} \sum_{\ell m} \cos\left(g\,s(\ell)\right)$$

definiert.

Gl. V.10 bestimmt die Wandkonfiguration. Diese Gleichung hat die

Form einer diskretisierten SG-Gleichung, wobei die Tiefe des nichtlinearen Potentials über γ_1 und γ_3 von den Gitterschwingungen abhängt. An dieser Stelle kommt damit die effektive Verringerung der Stärke des Substratpotentials zum Ausdruck, die eingangs dieses Abschnittes angesprochen wurde. Gl. V.11 bestimmt das modifizierte Phononenspektrum in Anwesenheit einer Domänenwand unter Berücksichtigung der Nichtlinearität des Substratpotentials im Rahmen des Variationsansatzes. Man beachte, daß für den Hamiltonian (Gl. V.4) in seiner linearisierten Form und ohne eine Domänenwand die Gleichungen V.10 und V.11 entkoppelt sind. Darüberhinaus reduziert sich $\hat{A}$ in diesem Fall auf $\hat{D}_1$ (Gl. V.5b).

V 5 Ergebnisse und Diskussion

Unter der Annahme, daß die Breite der Domänenwand groß gegen den Abstand $\delta = \sqrt{3}\, b/2$ zwischen benachbarten, zu $\vec{b}_1$ parallelen Reihen von Krypton-Atomen ist, kann die Wandkonfiguration aus Gl. V.10 durch Übergang zum Kontinuumslimes bestimmt werden. Gl. V.10 reduziert sich dann auf die gewöhnliche SG-Gleichung

$$-\frac{3\tilde{f}}{2}\,\delta^2\, s'' + \frac{\omega_T^{\,2}}{g}\sin(g\,s) = 0 \quad , \qquad \text{V.10a}$$

wobei ein Strich die Ableitung nach der Ortsvariablen ($\delta\ell \to z$) bezeichnet und $\omega_T^{\,2} = \omega_o^{\,2}\,(\gamma_1 + \gamma_3)/2$ ist. Daraus ergibt sich sofort für die charakteristische Solitonenbreite $2\,d = b\left(9\tilde{f}/2\omega_T^{\,2}\right)^{1/2}$. Die Vakua der SG-Theorie sind in der Notation von Gl. V.4 durch $2\Pi n/g$ ($n = 0, \pm 1, \ldots\ldots$) gegeben. Die Größe $\frac{2\Pi}{g} \equiv \frac{a_1}{b\tilde{g}}$ entspricht der Graphit-Gitterkonstanten in skalierten Größen (Kapitel V 1). Eine Lösung von Gl. V.10a mit den Randbedingungen

$$\lim_{\ell \to -\infty} s(\ell) = 0$$

$$\lim_{\ell \to +\infty} s(\ell) = -\frac{2\Pi}{g} \qquad \text{V.12}$$

entspricht damit genau der in Fig. V.2 gezeigten Wandstruktur, bei der die den beiden Vakua entsprechenden kommensurablen Strukturen A und B gerade um eine mögliche Adsorptionsstelle gegeneinander verschoben sind. Der topologische Erhaltungssatz der SG-Theorie entspricht in diesem Fall der inkommensurablen Domänenwand der Tatsache, daß die verschiedenen entarteten, kommensurablen Strukturen A, B, C jeweils zueinander inkommensurabel sind.

Die Lösung von V.10a mit den Randbedingungen V.12 ist durch

$$s(\ell) = -\frac{4}{g} \tan^{-1} \exp\left(\frac{\delta \ell}{d}\right) \qquad \text{V.13}$$

gegeben. Die durch 2 d charakterisierte Ausdehnung der Domänenwand ist hier noch über ω_T eine Funktion der Temperatur. Man sieht, daß die Renormierung des Substratpotentials in erwarteter Weise eine Verbreiterung der Wandkonfiguration bedingt. Um V.13 quantitativ auszuwerten, ist der interatomare Abstand festzulegen, für den die Nächst-Nachbar-Kraftkonstante ausgerechnet werden soll. Für die bisher gezeigten Resultate (Kapitel V 2) wurde der kommensurable Abstand b verwendet. Die Domänenwand wird jedoch gerade von den inkommensurablen Atomen gebildet. Genaugenommen hätte man deshalb die Abstandsabhängigkeit der Kraftkonstanten in der Variationsrechnung zu berücksichtigen. Um jedoch die Analyse übersichtlich zu halten, wird die vereinfachende Annahme verwendet, daß die Atome innerhalb einer Wand der inkommensurablen Kraftkonstante ausgesetzt sind. Während die Berücksichtigung der Abweichung der Kraftkonstante vom kommensurablen Wert für die Berechnung der Wandausdehnung wichtig ist, spielt sie für die Bestimmung des Phononenspektrums keine Rolle. Bezüglich der Phononen ist die Abweichung der Kraftkonstanten vom

kommensurablen Wert auf einen im Vergleich mit der großen Ausdehnung des Systems vernachlässigbaren Bereich begrenzt und kann deshalb bei der Berechnung der Dispersion unberücksichtigt bleiben.

Die Phononendispersion ergibt sich als Lösung von Gl. V.11. Die Summe in den Ausdrücken $\tilde{\gamma}_i$ ist gemäß der Kontinuumsbeschreibung in Gl. V.10a durch entsprechende Integrale zu ersetzen. Setzt man Gl. V.13 in diese Ausdrücke ein, so findet man für ein System mit linearer Ausdehnung $L = N^{1/2}\, b$: $\tilde{\gamma}_i = \gamma_i(1 + O(\frac{d}{L}))$. Wie in dem oben diskutierten Fall der Kraftkonstanten kann damit für ein großes System auch hier der Einfluß der Domänenwand auf die Phononen in erster Näherung vernachlässigt und $\tilde{\gamma}_i$ in $\hat{A}$ durch γ_i ersetzt werden. Unter Ausnutzung der sechs-zähligen Rotationssymmetrie des Dreiecksgitters findet man

$$\Delta_i = \frac{2}{3}<(\vec{s}_{\ell m}\vec{s}_{\ell m})>_T \equiv \Delta \qquad \text{V.14}$$

und Gl. V.11 reduziert sich auf

$$\omega^{(j)}(\vec{q})^2\, \vec{e}^{(j)}(\vec{q}) = \left\{ \hat{D}_o(\vec{q}) + \omega_o^2\, e^{-\frac{g^2\Delta}{2}}\, \hat{1} \right\} . \qquad \text{V.11a}$$

Nach Gl. V.11a ist nun die Phononendispersion selbstkonsistent zu bestimmen. Man beachte, daß Gl. V.11a ähnlich ist zu dem Resultat der quantenmechanischen Behandlung der SG-Theorie von Maki und Takayama (1979). Diese Ähnlichkeit folgt aus der Tatsache, daß die Bogoljubov-Ungleichung äquivalent zu Störungstheorie erster Ordnung ist. Die Renormierung im Rahmen der Variationsrechnung entspricht daher dem Effekt, den Maki und Takayama (1979) als "single loop" Korrektur bezeichnen. Wie bereits in Kapitel V 1 erwähnt wurde, ist die Kopplungsstärke für das vorliegende Modellsystem klein. Damit ist eine Behandlung in Störungstheorie erster Ordnung gerechtfertigt.

Fig. V.8 zeigt die Renormierung der Lücke ω_o im Phononenspektrum

als Funktion der Temperatur. Der bei T = 0 verbleibende Anteil der Renormierung ist eine Folge der Nullpunkts-Schwingungen der Atome.

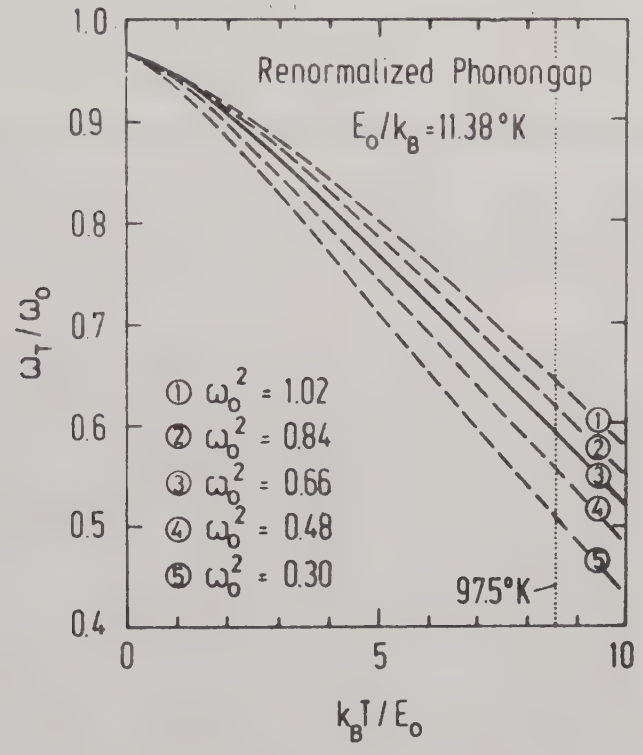


Fig. V.8 Renormierte Lücke ω_T im Phononenspektrum in Vergleich zum ursprünglichen Wert ω_0 als Funktion der Temperatur. Die durchgezogene Linie entspricht den Parametern des vorliegenden Modellsystems. (Aus: Schöbinger und Koch 1983)

Die Figur zeigt, daß dieser Effekt für Krypton auf Graphit kleiner als 5% ist. Dieses Ergebnis ist eine Folge der Tatsache, daß

$$\lim_{T\to 0} \frac{g^2\Delta}{2} \equiv \lim_{T\to 0} \frac{4\Pi^2 \langle \vec{S}_{\ell m}{}^2 \rangle_T}{b^2} \propto g^2 .$$

Damit ist, wie am Ende von Kapitel V 1 erwähnt wurde, der Quantencharakter des zweidimensionalen Krypton-Festkörpers vernachlässigbar. Man beachte jedoch, daß ω_0 bei Temperaturen um 100 K trotz der geringen Kopplungskonstante g^2 um 40% renormiert wird. Dies ist ein

Anzeichen dafür, daß die thermischen Fluktuationen wirklich einen deutlichen Effekt liefern. Darüberhinaus findet man im Limes hoher Temperaturen

$$f\langle \vec{S}_{\ell m}{}^2 \rangle_T \propto k_B T$$

in Übereinstimmung mit dem klassischen Gleichverteilungssatz. Es stellt sich damit heraus, daß die Renormierung in diesem Regime unabhängig von $\hbar$ und M ist, wie man es für eine statische, klassische Eigenschaft erwartet.

Um nun einen quantitativen Vergleich der Ergebnisse der vorliegenden Theorie und denen der MD-Simulation (Abraham et al 1982) durchzuführen, wurde die Wandbreite 2 d berechnet. Das Ergebnis ist in

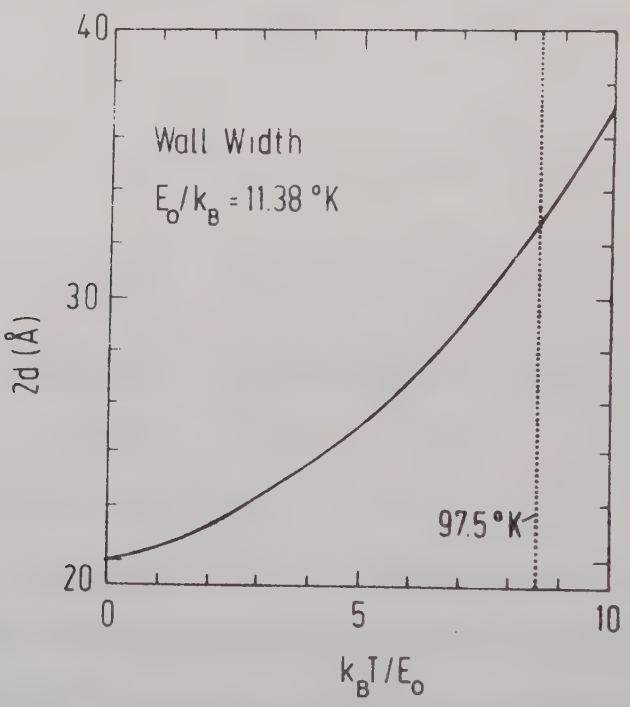


Fig. V.9 Ausdehnung 2 d der inkommensurablen Domänenwände als Funktion der Temperatur für $\omega_o{}^2 = 0.66$. (Aus: Schöbinger und Koch 1983)

Fig. V.9 gezeigt. Als Folge der thermischen Renormierung wächst die Breite mit zunehmender Temperatur. Der Vergleich mit dem MD-Resultat bei 97.5 K ($2d \gtrsim 30$ Å) zeigt, daß der theoretische Wert in der

richtigen Größenordnung liegt, jedoch etwas größer als der Wert der Simulation ist. Dies liegt an der vereinfachenden Annahme, die in die Berechnung der Kraftkonstanten eingeht. Grobe Abschätzungen zeigen, daß Verbesserungen gegenüber dieser Annahme zu einer leichten Reduzierung der Wandbreite führen, ohne daß sich dabei das Gesamtergebnis ändert. Zu ergänzen ist, daß die Wandbreite bei Temperaturen um 100 K hinreichend groß ist, sodaß sich die Kontinuumsnäherung gemäß Gl. V.10a aus dem Endergebnis selbstkonsistent rechtfertigt.

Ein interessanter experimenteller Test der berechneten Eigenschaften des Krypton-Systems auf Graphit wäre die Messung der Phononendispersion (Fig. V.7) des leicht inkommensurablen Krypton-Systems.

VI Resümee

In der vorliegenden Arbeit wurde an expliziten Beispielen gezeigt, inwieweit das Solitonen-Konzept in realen Systemen angewendet werden kann. Schon eingangs hat sich am Beispiel der Klasse nichtlinearer Klein-Gordon-Gleichungen gezeigt, daß dabei dem Begriff des "topologischen Solitons" zentrale Bedeutung zukommt. Deutlich wird der Teilchencharakter der topologischen Solitonen am Beispiel der mechanischen Pendelkette. Da die Streuung zwischen einzelnen Solitonen im Limes kleiner Solitonendichten in erster Näherung vernachlässigt werden kann, kann der Einfluß topologischer Solitonen zumindest in diesem Grenzfall im Rahmen der Vorstellung von einem idealen Solitonen-Gas diskutiert werden.

In den Fällen, in denen der topologische Erhaltungssatz für das reale System eine Näherung darstellt, wurden die Grenzen des Bildes topologischer Solitonen abgesteckt und mögliche experimentelle Konsequenzen diskutiert. Da sich Solitonen-Eigenschaften in Experimenten meist nur indirekt bemerkbar machen, kommt in diesem Zusammenhang der numerischen Simulation der Solitonendynamik bei der Überprüfung der entwickelten Modellvorstellungen große Bedeutung zu.

ANHANG: Dynamischer Strukturfaktor für unabhängige Solitonen

Für die magnetischen Modellsysteme ist der dynamische Strukturfaktor gegeben durch

$$S_{\alpha\alpha}(q,\omega) \propto \int dt \int dz\, e^{i(qz-\omega t)} \langle \delta S_\alpha(z,t)\, \delta S_\alpha(0,0) \rangle \quad . \qquad \text{A.1}$$

δS_α bezeichnet dabei die Abweichung der α-Komponente des Spins vom entsprechenden Grundzustandswert. Da die Solitonen im allgemeinen im Rahmen einer Kontinuumstheorie beschrieben werden können, wird in Gegensatz zu Gl. I.10b in Gl. A.1 das Integral für die räumliche Fouriertransformation verwendet. Die Unterscheidung zwischen longitudinalem und transversalem Strukturfaktor (Kapitel I 2.3, Abschnitt II), $S_{\parallel}(q,\omega)$ bzw. $S_{\perp}(q,\omega)$, bezieht sich auf die Richtung des äußeren Magnetfeldes. Im Falle des planaren Ferromagneten in einem Magnetfeld in x-Richtung (Gln. I.11 und I.11a) gilt:

$$S_{\parallel}(q,\omega) \equiv S_{xx}(q,\omega) \qquad \text{A.2a}$$

$$S_{\perp}(q,\omega) \equiv S_{yy}(q,\omega) + S_{zz}(q,\omega) \quad . \qquad \text{A.2b}$$

Im Rahmen der SG-Beschreibung des planaren Ferromagneten lassen sich diese Strukturfaktoren als Funktion des Azimutwinkels φ ausdrücken und man erhält (vgl. Kapitel I 2.3):

$$\delta S_\alpha \rightarrow \delta A(\varphi) \qquad \text{A.3a}$$

$$S_{\parallel} \rightarrow S_{cc} \qquad \text{A.3b}$$

$$S_{\perp} \rightarrow S_{ss} + S_{\varphi_t \varphi_t} \quad . \qquad \text{A.3c}$$

Unter der Annahme, daß die Solitonen bei hinreichend tiefen Temperaturen weit voneinander entfernt sind, kann man auch im Falle eines nicht-integrablen Systems von einer Überlagerung einzelner

Solitonen ausgehen. Es gilt dann in guter Näherung:

$$\delta S_\alpha(z,t) \simeq \sum_i \delta S_\alpha(z - z_i(t)) \qquad \text{A.4}$$

$$\delta S_\alpha(z,t)\, \delta S_\alpha(0,0) \simeq \sum_i \delta S_\alpha(z - z_i(t))\, \delta S_\alpha(z_i(0)) \quad , \qquad \text{A.5}$$

wobei $z_i(t)$ die Schwerpunktsbewegung der einzelnen Solitonen beschreibt. Gl. A.4 rechtfertigt sich aus dem vernachlässigbaren Überlapp der verschiedenen Solitonen bei großem Abstand. In Gl. A.5 kommt zusätzlich zum Ausdruck, daß in diesem Fall auch die Wechselwirkung zwischen den Solitonen in erster Näherung vernachlässigt werden kann und deshalb Korrelationen zwischen verschiedenen Solitonen unberücksichtigt bleiben können.
Ausgehend von einer homogenen Anfangsverteilung der Solitonen über die Spinkette bleibt damit zu berechnen (der Index α wird im folgenden weggelassen):

$$S(q,\omega) \propto \int dz \int dt \int dz(0)\, e^{i(qz-\omega t)} \langle \delta S(z - z(t))\, \delta S(z(0)) \rangle \, . \qquad \text{A.6}$$

Mit den Substitutionen $\rho = z - z(t)$, $\rho' = z(0)$ ergibt sich aus Gl. A.6 sofort

$$S(q,\omega) \propto \int dt \, \langle e^{i\{q(z(t)-z(0)-\omega t\}} M(q,u)^2 \rangle \qquad \text{A.7}$$

mit

$$M(q,u)^2 = \int d\rho \int d\rho'\, e^{iq\rho}\, e^{iq\rho'}\, \delta S(\rho)\, \delta S(\rho') \quad .$$

Gl. A.7 entspricht dem dynamischen Strukturfaktor eines Gases von Teilchen endlicher Ausdehnung, deren Schwerpunktsbewegung durch $z(t)$ beschrieben ist. Die endliche Ausdehnung findet ihren Ausdruck im Formfaktor $M(q,u)$, der nur für kleine q-Werte, $q \lesssim \frac{1}{d}$ ($2d$ ist die charakteristische Solitonenausdehnung) wesentlich von Null verschieden ist (siehe z.B. Mikeska 1978, Steiner 1979b).

Die Geschwindigkeitsabhängigkeit von M(q,u) ist dabei eine Folge davon, daß die Solitonenform im allgemeinen explizit von der Geschwindigkeit abhängt (siehe Abschnitt II).
Für die weitere Auswertung von Gl. A.7 ist nun der Fall der freien Solitonenbewegung von dem einer Diffusionsbewegung zu unterscheiden.

i) Freie Solitonenbewegung

In diesem Fall gilt $z(t) - z(0) = u\,t$ und das Integral über die Zeit ergibt einfach die Deltafunktion $\delta(q\,u - \omega)$. Um die thermische Mittelung richtig auszuführen, ist die Verteilung der Impulse p zu berücksichtigen:

$$<.....> \;=\; \int dp\, e^{-\beta \hat{E}(p)} \;.....\;. \qquad A.8$$

Übergang von den Impulsen zu den Geschwindigkeiten gemäß

$$\int dp\, e^{-\beta \hat{E}(p)} \;=\; \int du\, \frac{1}{u}\, \frac{\partial E(u)}{\partial u}\, e^{-\beta E(u)} \qquad A.9$$

führt dann schließlich auf Gleichung II.35:

$$S(q,\omega) \;\propto\; e^{-\beta E(u)}\, M(q,u)^2\, \frac{1}{u} \frac{\partial E}{\partial u}\Big|_{u=\frac{\omega}{q}} \;,$$

in die neben dem Formfaktor nur noch die Energie-Geschwindigkeits-Relation eingeht.

ii) Diffusion

Im Limes starker Dämpfung ist die Wahrscheinlichkeit $\rho(z(t);z(0);t)$ ein Teilchen, das zur Zeit t=0 am Ort z(0) war, zur Zeit t am Ort z(t) zu finden analog dem Fall der Brownschen Bewegung durch

$$\rho \;\propto\; \frac{e^{-\frac{(z(t) - z(0))^2}{4Dt}}}{\sqrt{Dt}}$$

gegeben, wobei $\mathcal{D}$ die Diffusionskonstante bezeichnet. Mit

$$\langle \ldots\ldots \rangle = \int dz(t)\, \rho(z(t);z(0);t) \ldots\ldots \qquad \text{A.10}$$

ergibt sich

$$\langle e^{iq(z(t)-z(0))} \rangle = e^{-\mathcal{D}q^2 t} \quad . \qquad \text{A.11}$$

Damit folgt im Falle der Diffusion Gl. IV.21;

$$S(q,\omega) \propto M(q,u)^2 e^{-\beta E(u)}\Big|_{u=0} \frac{\mathcal{D}}{(\mathcal{D}q)^2 + \left(\frac{\omega}{q}\right)^2} \quad .$$

Abschließend sei darauf hingewiesen, daß die beschriebene Berechnung des Solitonenbeitrages zum dynamischen Strukturfaktor im Falle des planaren Ferromagneten (Gl. I.12) nur für den longitudinalen Anteil verwendet werden kann. In Bezug auf die transversalen Korrelationen ist der planare Antiferromagnet in einem symmetriebrechenden Magnetfeld äquivalent zu einem Ising System. Korrelationsfunktionen können in diesem Fall unter Verwendung der Methode von Krumhansl und Schrieffer (1975) berechnet werden. Diese Autoren haben das φ^4 - System untersucht, das ebenfalls Ising Symmetrie aufweist.

REFERENZEN

Ablowitz M J, Kruskal M D, Ladik J F 1979 SIAM J. Appl. Math. 36,428

Abraham F F, Koch S W, Rudge W E 1982 Phys. Rev Lett. 49,1880

Akhiezer I A, Borovik A E 1967 Sov. Phys. JETP 25,332

Allroth E, Mikeska H J 1980 J. Phys. C13,L725

Babkin G I, Kravchenko V Ya 1971 JETP Lett. 13,19

Barma M 1975 Phys. Rev. B12,2710

——— 1977 Phys. Rev. B16,593

Barmatz M, Testardi L R, Eibschütz M, Guggenheim H J 1977 Phys. Rev. B15,4370

Barone A, Esposito F, Magee C J 1971 Riv. Nuovo Cim. 1(2),227

Bar'yakhtar V G, Druinskiĭ E I 1977 Sov. Phys. JETP 45,114

Benner H, Boucher J P, Renard J P, Seitz H 1983 J. Magn. and Magnetic Mat. 31-34,1233

Bernasconi J, Schneider T 1980 "Physics in One Dimension", Springer, Berlin

Birgeneau R J, Hammonds E M, Heiney P, Stephens P W, Horn P M 1980 in: Sinha S K ed. "Proceedings of the International Conference on Ordering in Two Dimensions", North Holland, New York

Bishop A R 1979a Physica Scripta 20,409

——— 1979b Sol. State Commun. 30,37

——— 1980 Z. Phys. B37,357

——— 1981a J. Phys. A14,883

——— 1981b Z. Phys. B44,185

Bishop A R, Lewis W F 1979 J. Phys. C12,3811

Bishop A R, Schneider T 1978 "Solitons in Condensed Matter Physics", Springer, Berlin

Bishop A R, Krumhansl J A, Trullinger S E 1980 Physica 1D,1

Blöte H W J 1975 Physica 79B,427

Borsa F, Boucher J P, Villain J 1978 J. Appl. Phys. 49,1326

Boucher J P, Benner H, Devreux F, Regnault L P, Rossat-Mignod J, Dupas C, Renard J P, Bouillot J, Stirling W G 198 Phys. Rev. Lett. 48,431

Broek siehe van den Broek

Buijs J A H M, de Jonge W J M 1982 J. Phys. C15,6631

Bullough R K, Caudrey P J 1980 eds. "Solitons", Springer, Berlin

Büttiker M, Landauer R 1981 Phys. Rev. A23,1397

Christiansen P L, Olsen O H 1980 Physica 1D,412

Cieplak M, Turski L A 1980 J. Phys. C13,L777

Cirillo M, Parmentier R D, Savo B 1981 Physica 3D,565

Coleman S 1977 in: Zichichi A ed. "New Phenomena in Subnuclear Physics" Part A, Plenum Press, New York

Coppersmith S M, Fisher D S, Halperin B J, Lee P A, Brinkman W F 1982 Phys. Rev. B25,349

Craik D J, Hill E 1974 Phys. Lett. 48A,157

Currie F 1977 Phys. Rev. A16,1692

Currie F, Trullinger S E, Bishop A R, Krumhansl J A 1977 Phys. Rev. B15,5567

Currie F, Krumhansl J A, Bishop A R, Trullinger S E 1980 Phys. Rev. B22,477

Dashen R, Hasslacher B, Neveu A 1975 Phys. Rev. D11,3424

de Jongh L J, Miedema A R 1974 Adv. Phys. 23,1

de Neef T, de Jonge W J M 1975 Phys. Rev. B11,4402

Derrick G H 1964 J. Math. Phys. 5,1252

Dupas C, Renard J-P 1977 J. Phys. C10,5057

Egami T, Graham C D jr. 1971 J. Appl. Phys. 42,1299

Eilbeck J C 1978 in: Bishop A R, Schneider T eds. "Solitons in Condensed Matter Physics", Springer, Berlin

Eilenberger G 1973 Z. Phys. B27,199

Eilenberger G 1981 "Solitons", Springer, Berlin

Enz U 1964 Helv. Phys. Acta 37,245

Fesser K 1979 Dissertation Universität Köln

Fisher M E 1964 Am. J. Phys. 32,343

Fivez J 1982 J. Phys. C15,L641

Fogedby H C 1980a J. Phys. A13,1467

———————— 1980b Physica Scripta 22,404

Fogel M B, Trullinger S E, Bishop A R, Krumhansl J A 1977 Phys. Rev. B15,1578

Frank F C, Van der Merwe J H 1949 Proc. Roy. Soc. 198,205,216

Friedberg R, Paul D I 1975 Phys. Rev. Lett. 34,1234,1415(E)

Ganot F, Dugautier C, Moch P, Nouet J 1982 Sol. State Commun. 44,975

Glauber R J 1966 Phys. Lett. 21,650

Goto T, Yamaguchi Y 1981 J. Phys. Soc. (Jpn) 50,2133

Goto E, Hayashi N, Miyashita T, Nakagawa K 1965 J. Appl. Phys. 36, 2951

Hackenbracht D, Schuster H G 1981 Z. Phys. B42,367

———————————— 1983a Phys. Rev. B27,572

———————————— 1983b Phys. Rev. B27,6916

Hagedorn F B 1970 J. Appl. Phys. 41,2491

Hilzinger H R 1977 Appl. Phys. 12,253

Hilzinger H R, Kronmüller H 1972 phys. stat. sol (b) 54,593

———————————— 1973 phys. stat. sol (b) 59,71

Horovitz B, Krumhansl J A, Domany E 1977 Phys. Rev. Lett. 38,778

Hubert A 1974 "Theorie der Domänenwände in geordneten Medien", Lecture Notes in Physics 26, Springer, Berlin

Huse D A, Fisher M E 1982 Phys. Rev. Lett. 49,793

Jongh siehe de Jongh

José J V, Sahni P S 1979 Phys. Rev. Lett. 43,78,1843(E)

———————————— 1980 Phys. Rev. B21,5381

Kakurai K, Steiner M 1983 J. Magn. and Magnetic Mat. 31-34,1215

Käräjämäki E, Laiho R, Levola T 1982 Phys. Rev. B25,6474

Karpman V I 1982 Phys. Lett. 88A,207

Kerr W C, Baeriswyl D, Bishop A R 1981 Phys. Rev. B24,6566

Kjems J K, Steiner M 1978 Phys. Rev. Lett. 41,1137

Klinker T 1983 Phys. Lett. 93A,437

Klinker T, Lauterborn W 1983 eingereicht Physica D

Koehler T R, Bishop A R, Krumhansl J A, Schrieffer J R 1975 Sol. State Commun. 17,1515

Koch W 1980 Z. Phys. B40,249

Koch S W, Abraham F F 1983 Helv. Phys. Acta 56,755

Korteweg D J, de Vries G 1895 Phil. Mag. 39,422

Krumhansl J A, Schrieffer J R 1975 Phys. Rev. B11,3535

Kudryavtsev A E 1975 JETP Lett. 22,82

Kumar P 1982 Phys. Rev. B25,483

Kumar P, Samalam V K 1982 Phys. Rev. Lett. 49,1278

Lamb Jr. G R 1980 "Elements of Soliton Theory", Wiley, New York

Landau L D, Lifshitz E M 1935 Phys. Z. Sowjet. 8,153

Lebesque J V, Snel J, Smit J J 1973 Sol. State Commun. 13,371

Lee B S 1973 Progr. Theor. Phys. 50,2093

Leibfried G, Ludwig W 1961 Sol. State Physics 12,275

Liebmann R, Schöbinger M, Hackenbracht D 1983 J. Phys. C16,L633

Lindgård P-A, Danielsen O 1974 J. Phys. C7,1523

Lindgård P-A, Kowalska A 1976 J. Phys. C9,2081

Lines M E 1977 Sol. State Commun. 22,75

Long K A, Bishop A R 1979 J. Phys. A12,1325

Lonngren K, Scott A 1978 "Solitons in Action", Academic Press, New York

Loveluck J M, Lovesey S W, Aubry S 1975 J. Phys. C8,3841

Loveluck J M, Schneider T, Stoll E, Jauslin H R 1980 Phys. Rev. Lett. 45,1505

Lovesey S W 1981 Sol. State Commun. 38,953

Lovesey S W, Steiner M 1981 Z. Phys. B42,241

Magyari E 1982 J. Phys. C15,L1159

Magyari E, Thomas H 1982 Phys. Rev. B25,531

——————— 1983a J. Phys. C16,L535

——————— 1983b Private Mitteilung

Maki K 1981a Phys. Rev. B24,3991

Maki K 1981b Phys. Rev. B24,335

——— 1982 Progr. Low Temp. Phys. Vol VIII,1

Maki K, Takayama H 1979a Phys. Rev. B20,3223

——————— 1979b Phys. Rev. B20,5002

Metha C L, Sudarshan E C G 1966 Phys. Lett 22,574

Mihály L 1979 Sol. State Commun. 31,409

Mikeska H J 1978 J. Phys, C11,L29

———— 1979 J. Magn. and Magnetic Mat. 13,35

———— 1982 Phys. Rev. B26,5213

Moncton D E, Stephens P, Birgeneau R, Horn P, Brown G 1981 Phys. Rev. Lett. 46,1533

Nakajima K, Yamashita T, Onodera Y 1974 J. Appl. Phys. 45,3141

Nakajima K, Sawada Y, Onodera Y 1975 J. Appl. Phys. 46,5272

Nakamura A 1978 Progr. Theor. Phys. 59,1447

Nakamura K, Sasada T 1974 Phys. Lett. 48A,321

Nakamura A, Takeno S 1977 Progr. Theor. Phys. 58,1074

Neef siehe de Neef

Parsa Z 1979 Am. J. Phys. 47,56

Patzak E, Mikeska H J 1981 Z. Phys. B42,317

Paul D I 1978 Phys. Lett. 64A,485

——— 1979 J. Phys. C12,585

——— 1982 J. Appl. Phys. 53,1649

Perring J K, Skyrme T H R 1962 Nucl. Phys. 31,550

Peyrard M, Remoissenet M 1982 Phys. Rev. B26,2886

Prelovšek P, Sega I 1981 J. Phys. C14,5609

Ramirez A P, Wolf W P 1982 Phys. Rev. Lett. 49,227

Regnault L P, Boucher J P, Rossat-Mignod J, Renard J P, Bouillot J, Stirling W G 1982 J. Phys. C15,1261

Reiter G 1981 Phys. Rev. Lett. 46,202,518(E)

Riseborough P S, Trullinger S E 1980 Phys. Rev. B22,4389

Riseborough P S, Mills D L, Trullinger S E 1981 J. Phys. C14,1109

Rosinski Ch, Elschner B 1977 J. Magn. and Magnetic Mat. 4,193

Saito Y 1980 Progr. Theor. Phys. 63,831

Salerno M 1981 Phys. Lett. 87A,116

Salinas S R 1973 J. Phys. A6,1527

Scalapino D J, Sears M, Ferell R A 1972 Phys. Rev. B6,3409

Schneider T, Stoll E 1981 Phys. Rev. B23,4631

Schöbinger M 1983 Phys. Rev. B27,3122

Schöbinger M, Jelitto R J 1981 Z. Phys. B43,199

Schöbinger M, Koch S W 1983 Z. Phys. B, im Druck

Scott A C 1969 Am. J. Phys. 37,52

Scott A C, Chu F Y F, Mc Laughlin D W 1973 Proc. IEEE 61,1443

Scott-Russell J 1844 "Reports on Waves" Proc. Roy. Soc. Edinburgh Seite 319

Seeger A, Schiller P 1966 in: Physical Acoustics III Part A,361

Seeger A, Donth H, Kochendörfer A 1953 Z. Phys. 134,173

Seitz H, Hagenah J U, Benner H 1983 Verh. DPG 4,711

Steele W A 1973 Surf. Sci. 36,317

Steiner M 1979a J. Magn. and Magnetic Mat. 14,142

———— 1979b J. Appl. Phys. 50,7395

———— 1981 in: Bernasconi J, Schneider T eds. "Physics in One Dimension", Springer, Berli

Steiner M, Axmann A 1976 Sol. State Commun. 19,115

Steiner M, Berthet C 1977 J. Magn. and Magnetic Mat. 4,206

Steiner M, Dorner B 1973 Sol. State Commun. 12,537

Steiner M, Krüger W, Babel D 1971 Sol. State Commun. 9,227

Steiner M, Villain J, Windsor C G 1976 Adv. Phys. 25,87

Steiner M, Kakurai K, Knop W, Pynn R, Kjems J K 1982 Sol. State Commun. 41,329

Takhtajan L A 1977 Phys. Lett. 64A,235

Theodorakopoulos N 1982 Z. Phys. B46,367

Theodorakopoulos N, Wünderlich W, Klein R 1980 Sol. State Commun. 33,213

Timonen J, Bullough R K 1981 Phys. Lett. 82A,183

Tjon J, Wright J 1977 Phys. Rev. B15,3470

Trullinger S E 1979 Sol. State Commun. 29,27

van den Broek J J, Zijlstra H 1971 IEEE Transactions on Magnetics 7,226

Villain J 1973 J. Phys. C6,L97

———— 1980 in: Riste T ed., "Ordering in Strongly Fluctuating Condensed Matter Systems",Plenum Press, New York,221

Villain J, Loveluck J M 1977 J. Physique 38,L77

Wojtczak L, Sukiennicki A 1982 Z. Phys. B47,223

Wysin G, Bishop A R, Kumar P 1982 J. Phys. C15,L337

Yajima N 1977 Progr. Theor. Phys. 58,1114

Yoshida F, Sakuma T 1977 J. Phys. Soc. (Jpn) 42,1412

———————— 1978 Progr. Theor. Phys. 60,338

Yoshida F, Nakayama T, Sakuma T 1976 J. Phys. Soc. (Jpn) 40,901

Zabusky N J, Kruskal M D 1965 Phys. Rev. Lett. 15,240

Zijlstra H 1970 IEEE Transactions on Magnetics 6,179

Danksagungen:

An dieser Stelle möchte ich Herrn Prof. Dr. R.J. Jelitto herzlich danken für die Anregung zu dieser Arbeit, für die Möglichkeit, sie bei ihm durchzuführen, sowie für sein fortwährendes Interesse an dieser Arbeit und seine nützlichen Hinweise.

Weiterhin danke ich allen Mitgliedern des Instituts für Theoretische Physik der Universität Frankfurt/M. für viele anregende Diskussionen, insbesondere Herrn D. Hackenbracht, Dr. S.W. Koch und Dr. R. Liebmann für die angenehme Zusammenarbeit.

Dem Sonderforschungsbereich 65, Frankfurt - Darmstadt, danke ich für die finanzielle Unterstützung und der GSI, Darmstadt für die Bereitstellung von Rechenzeit auf ihrer Computeranlage.

Lebenslauf:

4.10.1954	geboren in Frankfurt/Main Eltern: Franz Schöbinger und Paula Schöbinger, geb. Rüdenauer
Ostern 1961	Einschulung in die Westendschule II in Frankfurt/M.
1965	Wechsel in das Goethe-Gymnasium in Frankfurt/M.
6.6.1973	Abitur
Oktober 1973	Beginn des Physikstudiums an der J. W. Goethe-Universität, Frankfurt/M.
25.6.1975	Diplom - Vorprüfung
5.12.1978	Diplom - Hauptprüfung
15.1.1979-31.1.1980	Zivildienst im Psycho-sozialen Rehabilitationszentrum, Frankfurt/M.
1.2.1980	Beginn der Doktorarbeit bei Herrn Prof. Dr. R.J. Jelitto, Institut für Theoretische Physik, Universität Frankfurt/M.

Meine akademischen Lehrer waren:

U. Gerhardt, H. Haug, L.L. Hirst, R.J. Jelitto, R. Kulze,

W. Martienssen, E. Mohler, M. Reichert, H.G. Schuster, W. Schwarz